

WO 01/73019 A1



(81) **Bestimmungsstaaten (national):** AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZW.

(84) **Bestimmungsstaaten (regional):** ARIPO-Patent (GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZW), eurasisches Patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches Patent (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, TR),

OAPI-Patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

- mit internationalem Recherchenbericht
- vor Ablauf der für Änderungen der Ansprüche geltenden Frist; Veröffentlichung wird wiederholt, falls Änderungen eintreffen

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes, und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

ein Polypeptid und ggf. mindestens eine weitere Verbindung enthalten, wobei die Polypeptide im Kristall die oben beschriebene Raumform einnehmen. Weiterhin werden Verfahren zur Herstellung derartiger Kristalle und Verbindungen mit der Eigenschaft, als Liganden an Strukturbereiche eines Hop-Proteins zu binden, offenbart. Um Liganden mit Inhibitorfunktion für die Wechselwirkung zwischen einem Hop-Protein und mindestens einem Chaperon-Protein zu erhalten, werden zudem Verfahren zur Identifizierung derartiger Inhibitoren bereitgestellt. Derartige Inhibitoren können als Arzneimittel zum Einsatz kommen und beispielsweise zur Behandlung von Tumorerkrankungen, zur Immunsuppression, GvHD oder zur Behandlung von Virusinfektionen eingesetzt werden.

Raumform von TPR-Strukturmotiv enthaltenden Polypeptiden mit Chaperon-Bindungsfunktion, deren Kristalle und Verbindungen zur Inhibierung derartiger Polypeptide

Die vorliegende Erfindung betrifft Raumformen eines Polypeptids mit einer TPR-Strukturmotivsequenz, Verfahren zur Strukturaufklärung von derartigen Polypeptiden, Kristalle mit derartigen Raumformen, Verfahren zur Herstellung derartiger Kristalle, Verbindungen mit der Fähigkeit, hochaffin an durch derartige Raumformen vorgegebene Strukturbereiche zu binden, Verwendungen derartiger Verbindungen zur Herstellung eines Arzneimittels sowie für Arzneimittel für bestimmte medizinische Indikationen, Verfahren zur Ermittlung derartiger Verbindungen und Verwendungen der mittels vorgenannter Verfahren erhältlichen Verbindungen.

Aus dem Stand der Technik ist bekannt, daß bei einer Anzahl von zellulären Signalproteinen für deren Faltung und konformationelle Regulation eine Koordination der Wirkungen von Hsp70- und Hsp90-Chaperon-Proteinen erforderlich ist. Hierbei wären unter den Signalproteinen insbesondere nukleäre Rezeptoren von Steroidhormonen und mehrere Serin/Threonin- und Tyrosin-Kinasen mit Proto-Onkogeneigenschaften, wie z.B. Raf oder Src, zu nennen (Buchner, 1999, Trends Biochem. Sci. 24, 136-141; Caplan, 1999, Trends Cell. Biol. 9, 262-268; Pratt, 1997, Endocr. Rev. 18, 306-360).

Viele Polypeptidketten interagieren co-translational mit Chaperon-Proteinen der Hsp70-Familie, die dadurch ihre Wirkung entfalten, daß sie die Mißfaltung und Aggregation von naszierenden Proteinketten verhindern. Gerade an den Ribosomen synthetisierte Polypeptidketten werden entweder für die Auffaltung in ihre native Konformation freigegeben, und zwar ohne die Hilfe von weiteren Chaperon-Proteinen, oder aber zu einem diesbezüglich spezialisierten Chaperon-System weitergereicht (Hartl, 1996, Nature 381, 571-579; Johnson und Craig, 1997, Cell 90, 201-204). Unter diesen weiter stromabwärts wirkenden Systemen im eukaryotischen Cytosol sind insbesondere das Chaperonin-System TriC/CCT und der Hsp90-Multi-Chaperon-Apparat charakterisiert worden. Hsp90 erhält seine Substrate von Hsp70 in einer Reaktion, die in kritischer Weise von der Funktion des Hop-Proteins (Hsp70 und Hsp90 organisierendes Protein, auch als p60 oder Stilp bekannt) abhängig ist. In verschiedenen Arbeiten (Chang et al., 1997, Mol. Cell. Biol. 17, 318-325; Chen und Smith, 1998, J. Biol. Chem. 273, 35194-35200; Frydman und Höhfeld, 1997, Trends Biochem. Sci. 22, 1718-1720; Johnson et al., 1998, J. Biol. Chem. 273, 3679-3686) wurde gezeigt, daß das Hop-Protein als Adapterprotein spezifische Bindungsstellen für diese beiden vorgenannten Haupt-Chaperon-Proteine zur Verfügung stellt.

Honore et al. (1992 J. Biol. Chem. 267, 8485-8491) und Smith et al. (1993 Mol. Cell. Biol. 13, 869-876) konnten zeigen, daß das Hop-Protein fast ausschließlich aus TPR (Tetratricopeptid-"Repeats")-Domänen aufgebaut ist, selbständig aber keine Aktivität als Chaperon-Protein entfalten kann (Bose et al., 1996, Science 274, 1715-177; Freeman et al., 1996, Science 274, 1718-1720). Aus der Arbeit von Lamb et al. (1995, Trends Biochem. Sci. 20, 257-259) ist bekannt, daß TPR-Domänen aus drei oder mehr TPR-Strukturmotiven (mit ca. 34 AS Länge) bestehen, so daß sich die TPR-Domänen also durch degenerierte "Repeats" von einer Länge von 34 Aminosäuren auszeichnen.

Aufgrund der Primärsequenzdaten vom Hop-Protein wurde in der Literatur vorhergesagt, daß das Hop-Protein neun TPR-Strukturmotive enthält, die wiederum zwei TPR-Domänen bilden. Als Ergebnis der Analyse von Deletionsmutanten hatte sich nämlich ergeben, daß die N-terminale TPR-Domäne von Hop (TPR1 (drei TPR-Strukturmotive)) für die Wechselwirkung mit dem C-Terminus von Hsp70 verantwortlich ist, während eine C-terminale TPR2-Domäne (sechs TPR-Strukturmotive) im wesentlichen die Wechselwirkung des Hop-Proteins mit Hsp90 sicherstellt (Chen et al., 1996, Mol. Endocrinol. 10, 682-693; Demand et al., 1998, Mol. Cell. Biol. 18, 2023-2028; Lassle et al., 1997, J. Biol. Chem. 272, 1876-1884). Prodromou et al. (1999, EMBO J. 18, 754-762) konnten zeigen, daß das Hop-Protein die Hsp90-ATPase inhibiert und den Zugang von ATP oder des Inhibitors Geldanamycin zu ihrer Bindungstasche in der N-terminalen Domäne von Hsp90 blockiert (Stebbins et al., 1997, Cell 89, 239-250; Prodromou et al., 1997, Cell 90, 65-75 und 1999, EMBO J. 18, 754-762). Carrello et al. (1999, J. Biol. Chem. 274, 2682-2689) und Young et al. (1998, J. Biol. Chem. 273, 18007-18010) haben, genauso wie beim Hsp70-Chaperon, die Bindungsstelle des Hop-Proteins der C-terminalen Domäne des Hsp90-Chaperons zugeordnet. Hierbei konnten Chen et al. (1998, Cell Stress Chaperones 3, 118-129) zeigen, daß die Integrität des konservierten C-terminalen EEVD-Motivs bei Hsp90 eine wesentliche Komponente für die Wechselwirkung darstellen könnte. Auch ist aus dem Stand der Technik bekannt, daß die C-terminale Domäne von Hsp90 eine Anzahl von anderen TPR-enhaltenden Co-Chaperons bindet, wobei insbesondere die großen Immunophilinen Cyp-40, FKBP51 und FKBP52 und die Serin-Threonin-Phosphatase PP5 zu erwähnen sind (Buchner, 1999, Trends Biochem. Sci 24, 136-141; Dolinski et al., 1998, Mol. Cell. Biol. 18, 7344-7352; Marsh et al., 1998, Mol. Cell. Biol. 18, 7353-7359; Pratt und Toft, 1997, Endocr. Rev. 18, 306-360). Entsprechende Experimente von Owens-Grillo et al. (1996, J. Biol. Chem. 271, 13468-13575) und Young et al. (1998, J. Biol. Chem.

273, 18007-18010) ließen vermuten, daß nur ein TPR-Akzeptorplatz in dieser Region vorhanden ist. Aus der Arbeit von Ballinger et al. (1999, Mol. Cell. Biol. 19, 4535-4545) läßt sich entnehmen, daß, genauso wie die TPR1-Domäne von Hop-Proteinen, auch das TPR-Protein CHIP an den C-Terminus von Hsp70 bindet.

Aus den multiplen Sequenzvergleichen von TPR-Domänen verschiedener Proteine ist zu erkennen, daß es keine streng konservierten Aminosäurereste in den 34 Aminosäuren langen TPR-Strukturmotiven gibt. Lamb et al. (1995, Trends Biochem. Sci. 20, 257-259) stellten fest, daß es gleichwohl eine starke Präferenz für kleine hydrophobe Aminosäuren an gewissen Positionen der Struktur motive gibt.

Außerdem ist eine Kristallstruktur einer TPR-Domäne, und zwar des Hsp90-bindenden Proteins Phosphotase 5 (PP5), jedoch ohne einen (physiologischen oder unphysiologischen) Peptidliganden, gelöst worden, wobei sich herausstellte, daß jedes TPR-Strukturmotiv ein Helix-Turn-Helix-Motiv ausbildet (Das et al., 1998, EMBO J. 17, 1192-1199). Benachbarte TPR-Motive werden dabei in eine geordnete Folge von antiparallelen α -Helices gepackt. Das et al. (1998, EMBO J. 17, 1192-1199) haben daher vorgeschlagen, daß die TPR-Domänen spezifische Strukturelemente höherer Ordnung, z.B. Sekundär- oder Tertiärstrukturen, erkennen, um ihre biologische Funktion erfüllen können. Aus den Publikationen und Erkenntnissen des Standes der Technik ist gleichwohl nicht zu erkennen, auf welcher strukturellen Basis die Wechselwirkung zwischen Proteinen mit TPR-Domänen und beispielsweise Chaperon-Proteinen, wie z.B. Hsp70 und/oder Hsp90, beruht.

Aufgabe der vorliegenden Erfindung ist es daher, auf der Basis von biophysikalischen Methoden Erkenntnisse über die Wechselwirkung zwischen TPR-Domänen und ihren Bindungspartnern zu gewinnen und diese Erkenntnisse beispielsweise bei der Modellierung von Inhibitoren einzu-

setzen, die in Form eines molekularen Mimikry eine hohe Bindungsfähigkeit an die TPR-Domäne oder umgekehrt das Chaperon-Protein besitzen und derart kompetitiv die biologische Funktion der physiologischen Bindungspartner blockieren.

Erfindungsgemäß werden daher Kristallstrukturen von TPR-Domänen des Hop-Proteins (TPR1, TPR2A) in An- und Abwesenheit von Peptiden, die das Bindungsverhalten von Hop- und Chaperon-Proteinen simulieren, offenbart. Diese Strukturen erlauben eine Aussage über die Art und Weise der Interaktion zwischen TPR-Domänen enthaltenden Co-Chaperons und Chaperon-Proteinen, wie z.B. Hsp70 und Hsp90.

Gemäß Anspruch 1 der vorliegenden Erfindung wird eine Raumform eines Polypeptids beansprucht, wobei das Polypeptid in der Raumform mindestens eine Aminosäuresequenz eines TPR-Strukturmotivs eines Hop-Proteins oder ein Derivat bzw. ein Fragment einer Aminosäuresequenz eines solchen TPR-Strukturmotivs eines Hop-Proteins enthält. Bei diesen Aminosäuresequenzen eines TPR-Strukturmotivs eines Hop-Proteins kann es sich beispielsweise um die in Figur 3A dargestellten Aminosäuresequenzen, die dort fortlaufend mit (1), (2), (3), (4), (5), (6), (7), (8) und (9) bezeichnet werden, handeln. Derartige Polypeptide können bspw. die vorgenannten Aminosäuresequenzen allein oder in Kombination, z.B. als Kombination der Sequenzen (1), (4) und (7), oder in jeder anderen Kombination von 2, 4, 5, 6, 7, 8 oder 9 der vorgenannten Sequenzen, beispielsweise (2) mit (6) oder (3) mit (4), oder auch als Kombination aller neun vorgenannten Aminosäuresequenzen isoliert oder eingebettet bzw. verbunden durch andere ("Linker")-Aminosäuresequenzen in beliebiger Reihenfolge aufweisen.

Vorzugsweise wird das Polypeptid in der Raumform mindestens eine der Aminosäuresequenzen der TPR-Domänen TPR1, TPR2A und/oder TPR2B eines Hop-Proteins, eines Ab-

schnitts/e oder Derivats/e der vorgenannten TPR-Domänen
enthalten. Dies bedeutet, daß das Polypeptid in der Raum-
form mehrere TPR-Struktur motive in Form der physiologi-
schen TPR-Domänen eines Hop-Proteins enthalten kann. Bei
5 der TPR-Domäne kann es sich aber auch um nicht-
physiologisch auftretende Kombinationen von TPR-
Struktur motiven handeln. Beispielsweise fallen hierunter
auch Raumformen von Polypeptiden, die mindestens eine
TPR-Domäne enthalten, wobei die mindestens eine TPR-
10 Domäne aus beispielsweise drei TPR-Struktur motiven in ar-
tifizieller Kombination aufgebaut sein kann. Hierbei kann
es sich entweder um Kombinationen von bereits zuvor ge-
nannten, in Figur 3A wiedergegebenen Hop-TPR-
Struktur motiven aus verschiedenen TPR-Domänen von Hop-
15 Protein oder aber auch um eine beliebige Kombination von
Hop-TPR-Struktur motiven mit TPR-Struktur motiven anderer
TPR-Domänen enthaltender Proteine, insbesondere von TPR-
Domänen enthaltenden Co-Chaperons, handeln.

20 Unter dem Begriff Derivat eines TPR-Struktur motivs oder
einer TPR-Domäne eines Hop-Proteins werden solche Primär-
sequenzen verstanden, die die Raumform, d.h. also die
Tertiärstruktur der TPR-Domäne oder des TPR-
Struktur motivs, wie sie gemäß Figuren 3C, 3D oder 3E er-
25 mittelt wurden, weitgehend aufrechterhält und nur lokale
strukturelle Abweichungen erlaubt. Nach Überlagerung der
Tertiärstruktur der Primärsequenz des Derivats mit einer
der Ausgangsstrukturen gemäß Figur 3C, 3D oder 3E ist ei-
ne mittlere Standardabweichung für die Rückgrat-
30 Koordinaten (rmsd) von weniger als 5 Å, insbesondere we-
niger als 3 und ganz besonders weniger als 2 Å bevorzugt.

Insbesondere werden in diesem Zusammenhang solche Ami-
nosäuresequenzen als Derivate bezeichnet, die nur konser-
35 vative Substitutionen, d.h. den Austausch von bspw. pola-
ren gegen polare Aminosäuren oder von hydrophoben gegen
hydrophobe Aminosäuren (z.B. Leucin gegen Isoleucin oder
Valin oder umgekehrt oder Serin gegen Threonin oder umge-
kehrt) haben, verstanden. Als Abschnitt oder Fragment ei-

nes TPR-Strukturmotivs oder einer TPR-Domäne eines Hop-Proteins werden solche Sequenzen verstanden, die im Unterschied zur physiologischen Aminosäuresequenz insbesondere am N- oder C-Terminus Deletionen aufweisen, ggf.

5 aber auch intrasequentielle Deletionen in den vorgenannten und bspw. in den Figuren 3A und 3B wiedergegebenen Sequenzen. Hierbei wird es sich typischerweise um mindestens eine Deletion handeln, wobei in jeder Deletion vorzugsweise weniger als zehn, insbesondere weniger als
10 fünf, Aminosäuren, ganz besonders bevorzugt ein oder zwei Aminosäuren gegenüber der nativen Sequenz deletiert sein können.

In einer bevorzugten Ausführungsform der vorliegenden Erfindung wird eine Raumform eines Polypeptids beansprucht,
15 das mindestens eine der Aminosäuresequenzen (1), (2) oder (3), wie in Figur 3B wiedergegeben, enthält. Weiterhin sind solche Raumformen von Polypeptiden bevorzugt, die mindestens eine Aminosäuresequenz einer TPR-Domäne enthalten, wobei diese Sequenz(en) denjenigen Aminosäuresequenzen entsprechen, die bei Hop-Proteinen eukaryotischen Ursprungs auftreten. Gegebenenfalls kann es sich auch um
20 Derivate bzw. Abschnitte oder Fragmente im vorgenannten Sinn derartiger Sequenzen von Hop-Proteinen eukaryotischen Ursprungs handeln.
25

Ganz besonders bevorzugt sind allerdings Raumformen von Polypeptiden, die ein oder mehr TPR-Strukturmotiv/e oder TPR-Domäne/n eines Hop-Proteins humanen Ursprungs bzw.
30 Abschnitte oder Derivate derselben aufweisen. Ganz besonders bevorzugt sind Raumformen von Polypeptiden, wobei das Polypeptid die Aminosäuresequenz eines eukaryotischen, insbesondere humanen, Hop-Proteins, ggf. auch ein Derivat und/oder einen Abschnitt eines solchen eukaryotischen, vorzugsweise humanen, Hop-Proteins.
35

Weiterhin werden solche Raumformen beansprucht, die sowohl ein Polypeptid, enthaltend mindestens ein TPR-Strukturmotiv eines TPR-Domänen enthaltenden Proteins,

vor allem eines Hop-Proteins, als auch mindestens eine weitere Verbindung aufweisen. Hierbei wird es sich typischerweise um Verbindungen handeln, die als Liganden an das Polypeptid binden können, so daß die Raumform einen Komplex aus Polypeptid und mindestens einer weiteren auf kovalente oder nicht-kovalente Art gebundenen Verbindung darstellt. Hierbei kann es sich bei der Verbindung bzw. den Liganden um ein physiologisch auftretendes Molekül oder auch um ein nicht-physiologisch auftretendes Molekül handeln. Gegebenenfalls können, sofern mehr als ein Ligand in der Raumform auftritt, auch Kombinationen von physiologisch bzw. nicht-physiologisch auftretenden Molekülen in der Raumform enthalten sein. Bevorzugt sind dabei solche Liganden, die insbesondere unter physiologischen Bedingungen mit dem Polypeptid in Wechselwirkung treten und vorzugsweise hochaffines Bindungsverhalten zeigen (vorzugsweise $K_d < 30 \mu\text{M}$). Hierbei kann es sich beispielsweise um Chaperon-Proteine oder Abschnitte oder Derivate derselben handeln, die mit den entsprechenden in einer erfindungsgemäßen Raumform auftretenden Polypeptiden, enthaltend TPR-Struktur motive bzw. TPR-Domänen eines TPR-Domänen enthaltenden Proteins, vor allem eines Hop-Proteins, in Wechselwirkung treten.

Vorzugsweise wird erfindungsgemäß eine Raumform eines Polypeptids in Kombination mit Abschnitten von physiologischen Liganden offenbart. Dabei handelt es sich beispielsweise um die für die Wechselwirkung mit Hop-Proteinen relevanten Sequenzabschnitte bzw. Domänen von Chaperon-Proteinen, beispielsweise Hsp70 und/oder Hsp90. Typischerweise wird der Ligand, vorzugsweise ein physiologischer Ligand, an die in einem erfindungsgemäßen Raumform-Polypeptid enthaltene Sequenz eines TPR-Strukturmotivs binden bzw. insbesondere mit Aminosäuren einer im Polypeptid enthaltenen Aminosäuresequenz einer TPR-Domäne interagieren. Der Ligand kann selbst ein Polypeptid, ein Oligopeptid, ein Dipeptid oder ein synthetisch modifiziertes Derivat eines Poly-, Oligo- oder Di-

peptids, insbesondere von physiologisch die Wechselwirkung vermittelnden Abschnitten von Chaperon-Proteinen, aber auch ein Peptidomimetikum oder ein organisch-chemisches Molekül mit einem Molekulargewicht von typischerweise <5000 sein.

Ganz besonders bevorzugt sind Raumformen von Polypeptiden mit einem oder mehr Ligand/en, wobei der Ligand einen Abschnitt der C-terminalen Aminosäuresequenz eines Chaperon-Proteins, vorzugsweise von Hsp70 und/oder Hsp90, enthält oder ggf. aus diesem Abschnitt besteht. Der Ligand wird dann, wenn er nicht die gesamte C-terminale Domäne des Chaperon-Proteins aufweist, typischerweise die 5 bis 50, vorzugsweise 5 bis 25, ganz besonders bevorzugt 5 bis 12, C-terminalen Aminosäurereste eines solchen Chaperon-Proteins umfassen. Ganz besonders bevorzugt sind Raumformen, die insbesondere an ein TPR-Strukturmotiv bzw. eine TPR-Domäne gebundene Liganden zeigen, wobei die Liganden vorzugsweise eine Bindungsaffinität von $K_d < 50 \mu\text{M}$ haben und typischerweise dadurch zumindest in vitro, vorzugsweise auch in vivo, die physiologische Funktion von Hop-Proteinen blockieren. Dabei wird sich der inhibitorische Charakter des Liganden typischerweise dadurch funktionell ergeben, daß die Bindungsstelle(n) von Hop-Proteinen für die Chaperon-Proteine mit dem Liganden besetzt sind, so daß das Hop-Protein seine physiologische Adapterfunktion in Hinblick auf das physiologische Zusammenspiel von Hsp70 und Hsp90 verliert. Ganz besonders bevorzugt sind daher Raumformen von Polypeptiden, die mindestens ein Hop-TPR-Strukturmotiv oder eine TPR-Domäne enthalten, wobei der Ligand an das TPR-Strukturmotiv und/oder die TPR-Domäne andockt und gleichzeitig als Inhibitor der Interaktion zwischen den Proteinen Hop und Hsp70 und/oder den Proteinen Hop und Hsp90 wirkt. Typischerweise wird das Polypeptid in der erfindungsgemäßen Raumform sowohl Bindungsstellen für Hsp70 als auch für Hsp90 aufweisen und kann daher ggf. sowohl Liganden, die an die Hsp70-Bindungsstelle gebunden sind, als auch Li-

ganden, die an die Hsp90-Bindungsstelle gebunden sind, aufweisen.

Bei der erfindungsgemäßen Raumform eines Polypeptids der
5 zuvor offenbarten Art, ggf. in Kombination mit einem oder mehreren Ligand/en, wird es sich um eine durch NMR-Strukturanalyse gewonnene Raumform (Wüthrich, NMR-Spectroscopy, 1986) oder aber um eine Kristallform handeln. Die Kristallform wird als Ergebnis nach Kristallisierung des Polypeptids und ggf. weiteren Komponenten,
10 bspw. mindestens einem Liganden, mit nachfolgender röntgenkristallographischer Strukturaufklärung erhalten (Stout und Jensen, X-RAY Structure Determination, Wiley, 1989; die Offenbarung aus Stout und Jensen wird vollumfänglich in die vorliegende Offenbarung in Hinblick auf die Durchführung röntgenkristallographischer Experimente einbezogen).

Erfindungsgemäße Kristallformen zeichnen sich auch dadurch aus, daß sie als dreidimensionale Struktur, charakterisiert durch Strukturkoordinaten für jedes einzelne, die Struktur aufbauende Atom, Bestandteil einer symmetrischen Anordnung in einem Kristall sind. Dabei ist es bevorzugt, daß eine erfindungsgemäße Kristallform, die
25 mindestens ein Polypeptid mit mindestens einem TPR-Strukturmotiv oder vorzugsweise mindestens einer TPR-Domäne, ganz besonders von einem Hop-Protein, enthält, nach Überlagerung mit den in den Fig. 3C, 3D oder 3E aufgelisteten Strukturkoordinaten für das mindestens eine an der Bindungsreaktion beteiligte TPR-Strukturmotiv oder
30 die mindestens eine TPR-Domäne eine mittlere Standardabweichung (rmsd) von weniger als 2,5 Å, vorzugsweise von weniger als 2 Å, aufweist.

Liegt die Raumform als Kristallform vor, so wird die Kristallform typischerweise neben den Atomen des Polypeptids bzw. ggf. des/der Ligand/en (außer Wasserstoffatomen) weitere Metallionen enthalten, beispielsweise Erdalkali- oder Alkalimetallionen, insbesondere Calciumionen, aber

auch vor allem zur Phasenermittlung geeignete Schwermetallionen, wie z.B. Gold-, Nickel- oder Quecksilberionen.

Ganz besonders bevorzugt sind Raumformen von Polypeptiden, die als Kristallform vorliegen, dann, wenn die Kristallform des Polypeptids mindestens ein TPR-Strukturmotiv eines Hop-Proteins, und zwar insbesondere mindestens eine der Aminosäuresequenzen, die gemäß Figur 3A als Sequenzen (1), (2), (4), (5), (7) und/oder (8) bezeichnet werden, (oder deren Derivate oder Fragmente) enthält, wobei diese Sequenzen Strukturkoordinaten aufweisen, wie sie für die Sequenzen (1), (4) und (7) in Figuren 3C bzw. 3D und für die Sequenzen (2), (5) und (8) in Figur 3E angegeben sind. Die Figuren 3C und 3D geben die Strukturkoordinaten für die TPR-Domäne TPR1 von Hop wieder, während Figur 3E die Strukturkoordinaten der TPR-Domäne TPR2A von Hop auflistet. Die vorgenannten Primärsequenzen (1), (2), (4), (5), (7) und (8) gemäß Figur 3A können aufgrund ihrer Aminosäuresequenzen ihren jeweiligen Tertiärstrukturen, die in den Figuren 3C, 3D und 3E angegeben sind, ohne weiteres zugeordnet werden. Hierzu sind die Strukturkoordinaten der in den vorgenannten Sequenzen auftretenden Atome den Figuren 3C, 3D und 3E zu entnehmen. Die Auflistung der Atome in den Figuren 3C, 3D und 3E erfolgt jeweils sequentiell Aminosäure für Aminosäure vom N- zum C-Terminus.

Ganz besonders bevorzugt sind schließlich Raumformen eines Polypeptids als Kristallform, wenn das Polypeptid in der Kristallform mindestens eine TPR-Domäne eines Hop-Proteins (Struktur der Sequenzen (1) und (2) gemäß Figur 3B) mit allen entsprechenden Strukturkoordinaten, wie in Figur 3C und Figur 3D für die TPR-Domäne TPR1 und in Figur 3E für die TPR-Domäne TPR2A von Hop wiedergegeben, enthält.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind Kristalle, die Raum- bzw. Kristallformen, wie durch die

Ansprüche 1 bis 22 beansprucht, nach symmetrischen Gesetzmäßigkeiten angeordnet, aufweisen. Hierunter fallen Kristalle all jener Kristallformen, die gemäß vorliegender Erfindung offenbart werden. Gemäß der vorliegenden Erfindung werden nämlich Kristalle beansprucht, die aus Einheitszellen aufgebaut sind, wobei die asymmetrische Einheit in der Einheitszelle des Kristalls mindestens ein Polypeptid und ggf. mindestens eine weitere Verbindung aufweist und wobei weiterhin das Polypeptid im Kristall eine Raumform als Kristallform einnimmt, wie vorhergehend offenbart.

Vorzugsweise wird der Kristall eine Raumgruppe aufweisen, die monoklin, tetragonal, orthorhombisch, kubisch, triklin, hexagonal oder trigonal/rhombohedral ist. Hierbei kann es sich um native Kristalle, Derivatkristalle oder auch Cokristalle handeln. Typischerweise wird dabei die Raumgruppe des eine erfindungsgemäße Raumform als Kristallform aufweisenden Kristalls die Raumgruppe $P2_1$, $C2$ oder $P4_1$ sein. Grundsätzlich können aber erfindungsgemäße Raumformen (Kristallformen) in allen proteinkristallographisch möglichen Raumgruppen auftreten. Ganz besonders bevorzugt sind solche erfindungsgemäßen Kristalle, deren Einheitszelle Zellkonstanten von ungefähr $a = 31,2 \text{ \AA}$, $b = 43,8 \text{ \AA}$, $c = 38,3 \text{ \AA}$ und $\beta = 101,8^\circ$ oder $a = 75,5 \text{ \AA}$ und $c = 42,9 \text{ \AA}$ aufweist.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind Verfahren zur Herstellung eines Kristalls mit Einheitszellen, enthaltend in der asymmetrischen Einheit mindestens eine Raumform der erfindungsgemäßen Art, also eines Polypeptids und ggf. mindestens einer weiteren Verbindung, wobei (a) das Polypeptid in einem Expressionssystem überexprimiert wird, (b) das überexprimierte Polypeptid gereinigt und aufkonzentriert wird, (c) das gemäß (b) erhaltene Polypeptidkonzentrat in einem geeigneten Puffersystem, ggf. unter Hinzufügung mindestens einer weiteren Verbindung, gelöst wird und (d) die Kristallisierung bei-

spielsweise durch Dampfdiffusionsverfahren eingeleitet wird. Auch in Hinblick auf die Verfahrensmöglichkeiten bei der Kristallisierung werden die Angaben bei Stout und Jensen (s.o.) vollumfänglich in die vorliegende Offenbarung einbezogen.

Als weiterer Erfindungsgegenstand werden Verbindungen offenbart, die als Liganden an TPR-Struktur motive oder TPR-Domänen, die jeweils wiederum Bestandteile längerer Polypeptidketten sein können, vorzugsweise an TPR-

Struktur motive oder -Domänen von Hop-Proteinen binden können. Als Proteine mit TPR-Domänen, an die erfindungsgemäße Liganden andocken können, kommen bspw. auch PP5, FKBP51, FKBP52, Cyp40, TOM34, TOM70, CNS1-sc, TTC1, TTC2, TTC3, TTC4, IRSP, SGT oder KIAA0719 in Betracht. Erfindungsgemäße Verbindungen bilden nicht-kovalente Wechselwirkungen mit der Hauptkette und oder den Seitenketten von Aminosäuren, die Bestandteil einer TPR-Domäne, vorzugsweise einer TPR-Domäne eines Hop-Proteins oder eines der vorgehend genannten Proteine. Durch diese Bindung des Liganden wird vorzugsweise die physiologische Adapterfunktion des Hop-Proteins, das die Chaperon-Proteine Hsp70 und Hsp90 in mittelbaren Kontakt bringt, blockiert. Daher bindet in einer bevorzugten Ausführungsform die Verbindung die Raumform eines Polypeptids nach einem der Ansprüche 1 bis 22 oder die Raumform eines mindestens irgendein TPR-Strukturmotiv aufweisenden Polypeptids so, daß die physiologische Bindung von Chaperon -Proteinen insbesondere Hsp70 und/oder Hsp90, an das TPR-

Strukturmotiv bzw. die TPR-Strukturdomäne, vorzugsweise jene eines Hop-Proteins, blockiert wird. Die Liganden werden dabei vorzugsweise mit den Aminosäure Lys8, Asn12, Asn43, Lys73 und Arg77 (entsprechend der Zählweise im Hop-Protein) oder mit den an den entsprechenden Positionen befindlichen konservierten Aminosäuren anderer TPR-Domänenproteine (bspw. Fig. 3) in Wechselwirkung treten. Ganz besonders bevorzugt werden die Liganden mit der TPR Domäne einen Teil oder alle Wechselwirkungen ausbilden, die in den Figuren 4A und 4B schematisch für die jeweils

gebundenen Peptide dargestellt sind. Insbesondere werden die Liganden jene Wasserstoffbrückenbindungen, hydrophoben Kontakte, van-der-Waals-Wechselwirkungen oder elektrostatischen Wechselwirkungen eingehen, die auch die Peptide mit den komplementären Aminosäureresten der TPR-Domänen eingehen. D.h. ein erfindungsgemäßer Ligand wird vorzugsweise an äquivalenten sterischen Positionen mit den gebundenen Peptiden äquivalente funktionelle Gruppen aufweisen. Insbesondere wird ein erfindungsgemäßer Ligand ebenfalls eine Doppel-Carboxylat-Funktion besitzen, um in der TPR-Domäne verankert werden zu können. Im Zusammenhang mit den potentiellen Wechselwirkungen des Liganden einer TPR-Domäne wird auf die Beschreibung der Figur 4 und auf die Darstellung der Ergebnisse bei der Beschreibung der Ergebnisse der Ausführungsbeispiele verwiesen. Ein erfindungsgemäßer Ligand wird mindestens einige, ggf. alle der dort beschriebenen Wechselwirkungen mit der TPR-Domäne ausbilden, so daß eine Bindungsaffinität K_d von weniger als 100 μM , vorzugsweise weniger als 50 μM , ganz besonders bevorzugt weniger 20 μM sichergestellt ist.

Insgesamt wird ein erfindungsgemäßer Ligand also eine strukturelle Ausgestaltung haben, die dem Bindungsbereich einer TPR-Domäne, vorzugsweise eines Hop-Proteins, vor allem den strukturellen Vorgaben aus den Figuren 3C, 3D oder 3E, komplementär ist. Bei diesen Liganden mit vorzugsweise Inhibitorfunktion für eine Chaperon- oder Co-Chaperon-Funktion kann es sich um modifizierte oder unmodifizierte Di-, Oligo- oder Polypeptide handeln. Auch ein Peptidomimetikum eines Di- oder Oligopeptids ist denkbar. Bei den Peptidomimetika wird es sich vorzugsweise um solche Verbindungen handeln, deren Rückgrat keine amidartigen Bindungen, sondern andere chemische Brücken aufweisen, um die proteolytische Spaltung zu vermeiden. Bei der Eine erfindungsgemäße Inhibitorverbindung kann bspw. ein C-terminalen Abschnitt eines Chaperon-Proteins, vorzugsweise Hsp70 oder Hsp90 sein. Besonders bevorzugt sind Peptide, die die letzten 50, weiter bevorzugt die letzten 30, noch weiter bevorzugt die letzten 20, noch weiter be-

vorzugt die letzten 8 bzw. 10 und am stärksten bevorzugt die letzten 5 C-terminalen Aminosäuren von Hsp70 oder Hsp90 enthalten, wobei ggf. diese Peptidsequenz chemisch modifiziert ist, bspw. durch Modifizierungen des Peptid-
5 drückgrats. Dies bedeutet, daß ein derartiges modifiziertes oder unmodifiziertes erfindungsgemäßes Peptid die Aminosäuren EEVD am C-Terminus enthalten kann.

Besonders bevorzugt als erfindungsgemäße Inhibitoren sind modifizierte oder unmodifizierte Oligopeptide, die vor-
10 zugsweise am C-Terminus die Aminosäuresequenzen GPXIEEVD (Ein-Buchstaben-Code) oder SXMEEVD enthält, wobei X für eine beliebige, natürlich auftretende Aminosäure steht.

Insbesondere umfaßt die vorliegende Erfindung solche Liganden, die an eine Raum- oder Kristallform, die durch
15 die Strukturkoordinaten nach Figur 3C, 3D oder 3E dargestellt ist, binden können.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind Verfahren zur Identifizierung einer Verbindung, die die
20 Eigenschaft besitzt, als Inhibitor der Wechselwirkung zwischen Hop-Protein und dem Chaperon-Protein, insbesondere Hsp70 oder Hsp90, vor allem humanem Hsp70 und/oder Hsp90, zu wirken. Insbesondere bevorzugt ist ein solches Verfahren dann, wenn die Verbindung mit Ligandenfunktion
25 an einen Strukturbereich einer TPR-Domäne, insbesondere im Bereich des aktiven Bindungszentrums, bindet. Ein solches Verfahren ist dadurch gekennzeichnet, daß (a) eine Kristallform nach den Ansprüchen 1 bis 22 erhalten wird, wobei die Kristallform in Form ihrer Strukturkoordinaten
30 vorliegt, (b) die Strukturkoordinaten der Kristallform in drei Dimensionen dargestellt werden, (c) und die sterischen Eigenschaften und/oder funktionellen Gruppen einer Verbindung mit Ligandenfunktion so gewählt werden, daß Wechselwirkungen zwischen der Verbindung und den Haupt-
35 und/oder Seitenketten des Polypeptids, das das aktive Zentrum bildet, möglich werden. Nach Maßgabe dieser Wechselwirkungen werden erfindungsgemäß geeignete Liganden,

insbesondere geeignete inhibitorische Liganden, die die Wechselwirkung zwischen Hop-Protein und Hsp70 und/oder Hsp90 blockieren, ermittelt.

5 Die Darstellung der Strukturkoordinaten einer erfindungs-
gemäßen Kristallform erfolgt vorzugsweise durch graphi-
sche Darstellung mit Hilfe entsprechender Computerpro-
gramme auf einem Computerbildschirm. Anhand der, bezogen
auf potentielle Liganden, komplementären Anordnung der
10 Haupt- und Seitenketten der Kristallform, beispielsweise
im Bindungsbereich einer TPR-Domäne, beispielsweise eines
Hop-Proteins oder strukturell verwandtes Proteins kann
nicht-automatisiert nach Erfahrung des Operators geeigne-
te Liganden mit entsprechenden chemischen und/oder steri-
15 schen Eigenschaften identifiziert, am Bildschirm konstru-
iert und schließlich deren Bindungsverhalten simuliert
werden.

Vorzugsweise aber erfolgt die Auswahl geeigneter Liganden
20 jedoch automatisiert dadurch, daß Computerdatenbanken,
die eine Vielzahl von Verbindungen enthalten, durchsucht
werden. Die Suche wird auf die zuvor erfolgende Charakter-
isierung von geometrischen, chemischen und/oder physika-
lischen Eigenschaften für die gewünschten Liganden, bei-
25 spielsweise Verbindungen mit struktureller und/oder funk-
tioneller Ähnlichkeit zu den in den Ansprüchen 28 bis 37
beanspruchten Verbindungen, gestützt. Zu durchmusternde
Datenbanken enthalten natürlich auftretende wie auch syn-
thetische Verbindungen. Beispielsweise können die in der
30 CCDC (Cambridge Crystal Data Center, 12 Union Road, Cam-
bridge, GB) gespeicherten Verbindungen für eine derartige
Suche herangezogen werden. Aber auch die bei Tripos (s.
Zitat a.a.O.) erhältlichen Datenbanken, nämlich Aldrich,
Maybridge, Derwent World Drug Index, NCI und/oder Chapman
35 & Hall können durchsucht werden. Die folgenden Computer-
programme können für eine derartige Durchmusterung einge-
setzt werden: insbesondere das Programm "Unity", "FLEX-X"
(Rarey et al. J. Mol. Biol. 261, 470-489, 1996), "Cscore"

(Jones et al., J. Mol. Biol. 245, 43, 1995) aus der Sybyl Base-Umgebung des Tripos-Programmpakets.

Im folgenden wird die Durchführung eines erfindungsgemä-
5 ßen Verfahrens zur Computer-gestützten Identifizierung
potentieller Liganden näher beschrieben. Zunächst muß der
gewünschte Bindungsbereich eines Liganden in einer erfin-
dungsgemäßen Kristallform definiert werden. Bei dem Li-
ganden wird es sich typischerweise um einen solchen mit
10 inhibitorischen Eigenschaften handeln, aber auch Aktiva-
toren sind denkbar. Der Bindungsbereich wird durch ent-
sprechende Parameter, beispielsweise Atomabstände, Was-
serstoffbrücken-Bindungspotentiale, hydrophobe Bereiche
und/oder Ladungen, charakterisiert und auf dieser Basis
15 Randbedingungen für die chemischen, physikalischen
und/oder geometrischen Eigenschaften des Liganden defi-
niert. Ganz besonders bevorzugt sind an der Bindung min-
destens eine der bereits zuvor spezifizierten Aminosäuren
(siehe Anspruch 31), insbesondere mit den vorgenannten
20 Seitenketten derselben, beteiligt. Daher wird auch für
ein vorliegendes erfindungsgemäßes Verfahren zur Identi-
fizierung von Verbindungen auf die vorangegangene Offen-
barung zum Erfindungsgegenstand "Verbindung" gemäß An-
sprüchen 28 bis 37 vollinhaltlich Bezug genommen. Compu-
25 terprogramme identifizieren in entsprechenden Datenbanken
dann solche Verbindungen, die die zuvor eingeführten Be-
dingungen erfüllen. Hierbei ist es besonders bevorzugt,
das Programmpaket Sybil Base (Tripos, 1699 South Hanley
Road, St. Louis, Missouri, USA) zu verwenden. Besonders
30 bevorzugt ist es dabei, daß die zu durchsuchende Daten-
bank Verbindungen unter Angabe ihrer jeweiligen dreidi-
mensionalen Strukturen zur Verfügung stellt. Sollte dies
nicht gegeben sein, wird für ein erfindungsgemäßes Ver-
fahren vorzugsweise in einem Verfahrensschritt (d) ein
35 Computerprogramm eingesetzt werden, das vor der Prüfung,
ob die vorgegebenen Randbedingungen von einem Liganden
erfüllt sind, zunächst deren dreidimensionale Struktur
berechnet (z.B. das Programm "CONCORD" aus der Sybyl-
Umgebung von Tripos Inc.).

Typischerweise wird in einem Verfahrensschritt (e) das Wechselwirkungspotential zwischen einer identifizierten Verbindung, beispielsweise im Rahmen einer automatisierten Suche einer Verbindung aus einer Computerdatenbank, und dem gewünschten Bindungsbereich in einer Kristallform ermittelt. Ganz besonders bevorzugt ist ein erfindungsgemäßes Verfahren dann, wenn es zur Identifizierung von Verbindungen, die an eine Kristallform mit den Strukturkoordinaten der Fig. 3C, 3D oder 3E andocken sollen, dient. Die Stärke der gemäß Verfahrensschritt (e) ermittelten Wechselwirkung zwischen einer Verbindung aus einer Computerdatenbank und einer erfindungsgemäßen Kristallform geben Anhaltspunkte für deren Eignung, als Liganden eingesetzt werden zu können.

Nicht automatisiert gestaltet sich ein Verfahren zur Identifizierung geeigneter Verbindungen mit Ligandencharakter wie folgt. Eine Gerüstverbindung als Ausgangspunkt der Identifizierung wird in den durch die zu identifizierende Verbindung auszufüllenden Raum im Innern oder an der Oberfläche der Kristallform, z. B. in den Bindungsbereich einer TPR-Domäne in dem kristallisierten Polypeptid, manuell eingefügt. Für den nach Einfügung der Gerüststruktur noch verbliebenen Raum wird nach Fragmenten gesucht, die in Wechselwirkung mit der umgebenden Kristallform treten können und sich an die Gerüststruktur anlagern lassen. Diese Suche nach geeigneten Fragmenten erfolgt also nach Maßgabe der geometrischen und/oder physikochemischen Gegebenheiten der dreidimensionalen Struktur. Die Suche nach geeigneten Fragmenten kann beispielsweise als automatisierte Computersuche unter Vorgabe entsprechender Randbedingungen geführt werden. Etwaige durch den Operator und/oder durch die Computersuche ermittelten Fragmente werden nach Maßgabe chemischer Gesetzmäßigkeiten an die Ausgangsgerüststruktur des Startmodells graphisch angelagert und nach jedem derartigen Schritt das Wechselwirkungspotential mit dem Zielstrukturbereich in der Kristallform errechnet. Die Vorgehensweise erfolgt so

lange, bis das Wechselwirkungspotential zwischen der zu identifizierenden Verbindung und dem Zielstrukturbereich optimiert ist.

5 Die Vorgehensweise der Schritte (c), (d) und (e) kann zyklische so lange wiederholt werden, bis eine Verbindung oder eine Verbindungsklasse in bezug auf ihr Bindungsverhalten, berechnet nach einem Wechselwirkungspotential, das dem jeweiligen Computerprogramm als Algorithmus zu-
10 grundeliegt, optimiert ist. Die durch eine relativ grobe Charakterisierung des Bindungsbereichs der Kristallform zunächst erhaltene große Zahl an potentiell bindungsfähigen Verbindungen kann durch weitergehende Vorgaben physikalische-chemischer oder sterischer Charakteristika an
15 die gewünschte Zielverbindung zunehmend reduziert werden.

Insbesondere bietet sich hierfür auch eine sinnfällige Kombination der nicht-automatisierten und der automatisierten Suchverfahren nach geeigneten Verbindungen an. So
20 etwa könnte eine zunächst durch automatisierte Computersuche aus Computerdatenbanken identifizierte Verbindung nicht-automatisiert durch Anlagerung von Fragmenten mit geeigneten funktionellen Gruppen verbessert werden.

25 Schließlich ist es im Rahmen der vorliegenden Erfindung bevorzugt, die durch derartige erfindungsgemäße Verfahren per automatisierter Computersuche erhaltenen Verbindungen zu synthetisieren oder, falls bereits synthetisiert und zugänglich, einer chemischen Bibliothek zu entnehmen und
30 in einem geeigneten biologischen Testsystem in einem Verfahrensschritt (f) auf ihre biologische Wirksamkeit hin zu untersuchen. Abhängig vom Ergebnis des biologischen Testsystems, bei dem es sich z. B. um einen Ligandenbindungsassay handeln kann, können dann weitere chemische
35 Modifikationen der zuvor ermittelten Verbindung oder der Verbindungsklasse vorgenommen werden. Hierbei kann sich dann insbesondere die Anwendung von Programmpaketen zur Identifizierung geeigneter Fragmente, die gegen vorhandene Fragmente an der zuvor identifizierten Verbindung aus-

getauscht oder an dieselbe zusätzlich angelagert werden könnten, als sinnvoll erweisen.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind
5 gleichfalls Verfahren zur Identifizierung einer Verbindung mit der Eigenschaft, als Ligand, typischerweise als Inhibitor der Wechselwirkung zwischen einer TPR-Domäne und einem Chaperon-Protein wirken zu können, wobei in einem solchen erfindungsgemäßen Verfahren in einem Verfahrensschritt (a) ein biologisches Testsystem vorangestellt
10 wird, anhand dessen ein sog. "Screening" nach geeigneten Zielverbindungen durchgeführt wird. Auch hier können bevorzugt ein Bindungsassay als biologisches Testsystem dienen. In den weiteren Verfahrensschritten werden zunächst gemäß (b) solche Verbindungen (beispielsweise aus einer Bibliothek chemischer Verbindung) identifiziert,
15 die ein positives Ergebnis im biologischen Test gezeigt haben. Diese Verbindungen, beispielsweise inhibierend oder gegebenenfalls auch aktivierend, werden in bezug auf ihre beispielsweise geometrischen und/oder chemischen Eigenschaften, insbesondere in bezug auf ihre dreidimensionale Struktur, charakterisiert (Verfahrensschritt (c)).
20 Sofern die dreidimensionale Struktur der als Treffer im biologischen Test ermittelten Verbindungen nicht a priori bekannt ist, kann dieselbe durch Methoden der Struktur-
25 aufklärung, nämlich Röntgenkristallographie und/oder NMR-Spektroskopie, oder auch durch Modellierungen oder z.B. semi-quantenchemische Berechnungen ermittelt werden. In die gemäß Verfahrensschritt (d) als dreidimensionale
30 Struktur dargestellten atomaren Strukturkoordinaten einer erfindungsgemäßen Kristallform werden dann gemäß (e) die im Rahmen der Verfahrensschritte (b) und (c) erhaltenen Verbindungen eingefügt. Hierbei kann es sich um Verbindungen handeln, die an einem für die physiologische Bindungsstelle relevanten Abschnitt oder aber auch an die
35 Oberfläche des Polypeptids in der Kristallform binden. Das Einfügen der Verbindung in die Kristallform kann manuell nach der Erfahrung des Operators erfolgen oder aber auch automatisiert, indem mit Hilfe entsprechender Compu-

terprogramme ("Dock" Kuntz et al., 1982, J. Mol. Biol. 161, 269-288, Sybyl/Base "FLEX-X", s. Zitat a.a.O.) eine Positionierung des Liganden mit der stärkstmöglichen Wechselwirkung zwischen Ligand und dem Zielstrukturbe-
reich ermittelt wird (Verfahrensschritt (e)).

Indem eine derart erhaltene Verbindung graphisch in Kombination mit der in der Kristallform vorliegenden Struktur dargestellt wird, können weitere Verfahrensschritte erfolgen, die die Wirksamkeit der Zielverbindung verbessern. Insbesondere kann eine derart, bereits als geeignet identifizierte Verbindung als Basis ("template") für noch wirksamere Verbindungen, z. B. Verbindungen mit noch höherer Bindungskonstante, dienen. In diesem Zusammenhang können die bereits gemäß Ansprüchen 41 bis 46 beschriebenen Verfahren und Ansätze zum Einsatz kommen. Bevorzugt ist eine Vorgehensweise, die insoweit zyklisch ist, als nach dem "Screening" im biologischen Testsystem eine strukturelle Darstellung erfolgt und mit Hilfe von Computermethoden auf der Basis der im biologischen Testsystem erhaltenen Ergebnisse wirksamere Verbindungen ermittelt werden, die schließlich wiederum als Ausgangspunkt für den nächsten Zyklus, an dessen Beginn ein biologisches Testsystem steht, dienen. Biologische Testsysteme (in vitro oder in vivo) können Aussagen über die Qualität der Verbindung, z.B. als Inhibitor der biologischen Reaktion, also des Bindungsereignisses, oder über die Bindungskonstante, die Toxizität oder die Metabolisierungseigenschaften oder gegebenenfalls über das Membrandurchtrittsvermögen der Verbindung etc., gemacht werden.

Schließlich werden im Rahmen der vorliegenden Erfindung alle solchen Verbindungen beansprucht, die als Ergebnis eines Verfahrens nach einem der Ansprüche 41 bis 48 erhalten werden oder erhältlich sind.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind Verfahren zur Herstellung einer Raum- oder Kristallform mit mindestens einem Polypeptid nach einem der Ansprüche

1 bis 22, wobei in einem Verfahrensschritt (a) zunächst das Polypeptid in einem Expressionssystem überexprimiert, synthetisiert oder isoliert wird, (b) das gemäß (a) erhaltene Polypeptid in einem geeigneten Puffersystem gelöst wird und (c) die Kristallisierung, beispielsweise durch Dampfdiffusionsverfahren, eingeleitet wird. Typischerweise wird gemäß Verfahrensschritt (b) eine konzentrierte oder hochkonzentrierte Lösung des (der) Polypeptids/e vorliegen. Erfolgt die Kristallisierung des mindestens einen Polypeptids zu erfindungsgemäßen Kristallen, die erfindungsgemäße Kristallformen aufweisen, mit dem Ziel, die Kristalle nachfolgend zur Röntgenstrukturanalyse einzusetzen, so folgt nach der Kristallisierung die Sammlung von Röntgendiffraktionsdaten, die Bestimmung der Einheitszellkonstanten und der Symmetrie sowie die Berechnung der Elektronendichtekarten, in die das (die) Polypeptid/e hineinmodelliert werden.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind Verfahren zur dreidimensionalen Darstellung einer Kristallform unbekannter Struktur mit mindestens einem Polypeptid, das mindestens ein an der Bindung an ein Chaperon-Protein, vorzugsweise ein Hsp70- und/oder Hsp90-Protein beteiligtes TPR-Strukturmotiv oder vorzugsweise TPR-Strukturdomäne, insbesondere aus einem Hop-Protein, enthält. Ein solches Verfahren ist dadurch gekennzeichnet, daß die Kristallform mit unbekannter Struktur auf der Basis einer erfindungsgemäßen Kristallform mit bekannter Struktur, beispielsweise auf Basis der in Fig. 3C, 3D oder 3E festgehaltenen Strukturkoordinaten, ermittelt wird. Hierbei gibt es verschiedene Möglichkeiten, bekannte Strukturkoordinaten erfindungsgemäßer Kristallformen zur Strukturaufklärung von Polypeptiden oder Polypeptidkomplexen mit bislang unbekannten 3D-Strukturen (Zielstruktur), die jedoch mit der bekannten erfindungsgemäßen Kristallform gewisse Homologien in der Primärsequenz zeigen, einzusetzen.

Eine Möglichkeit ist in diesem Zusammenhang die Verwendung von Phaseninformation, die aus bekannten Ausgangsstrukturkoordinaten, beispielsweise den Strukturkoordinaten oder Teilen dieser Strukturkoordinaten gemäß Fig. 3C, 3D oder 3E, entnommen werden können. Hierzu wird die Phaseninformation, die im Falle einer bekannten 3D-Struktur einer erfindungsgemäßen Kristallform vorliegt bzw. berechnet werden kann, eingesetzt, um eine unbekannte Struktur, die sich vorzugsweise gegenüber der bekannten Struktur nur durch nicht wesentliche konformationelle Abweichungen unterscheidet (als Beispiele zu nennen wären Zielstrukturen, an die erstmals ein Ligand oder ein anderer Ligand als in der Ausgangsstruktur gebunden ist, oder Derivate, z.B. Zielstrukturen, die Mutanten der Ausgangsstruktur sind) zu lösen. Hierzu wird die Phaseninformation der gesamten oder eines Teils der bekannten Struktur mit den für die Kristallform unbekannter Struktur gesammelten Intensitäten der Reflexe kombiniert und aus dieser Kombination eine Elektronendichtekarte für die Kristallform unbekannter Struktur berechnet. Diese Methode wird als "molekulares Ersetzen" ("molecular replacement") bezeichnet. Vorzugsweise wird das molekulare Ersetzen mit dem Programmpaket X-PLORE (Brünger, Nature 355, 472-475, 1992) durchgeführt.

Eine weitere Möglichkeit, vorliegende erfindungsgemäße Kristallformen zur Strukturaufklärung von strukturell verwandten Sequenzen bzw. beim Vergleich der Primärstrukturen mit zumindest teilweise homologen Polypeptidketten einzusetzen, besteht erfindungsgemäß darin, daß (a) die Primärsequenz eines Polypeptids unbekannter 3D-Struktur mit einer Primärsequenz eines Polypeptids, das mindestens ein TPR-Strukturmotiv oder eine TPR-Domäne, vorzugsweise eines Hop-Proteins, aufweist, verglichen wird und im Rahmen dieses Vergleichs homologe Abschnitte zwischen dem Polypeptid unbekannter Struktur und der Primärsequenz eines Polypeptids mit mindestens einem TPR-Strukturmotiv, vorzugsweise einem Protein mit einer TPR-Bindungsdomäne, geeignet für die Bindung an ein Chaperon-Protein, ganz

besonders bevorzugt ein Hop-Protein, dessen Raum- oder vorzugsweise Kristallform bekannt ist, identifiziert werden, (b) die homologen Abschnitte in Anlehnung an die bekannte 3D-Struktur modelliert wird und schließlich gemäß
5 Verfahrensschritt (c) mit Hilfe geeigneter Computerprogramme die modellierte 3D-Struktur des Polypeptids in Hinblick auf ihre sterischen Verhältnisse optimiert wird.

Das sog. "Alignment" der Primärsequenzen von zu vergleichenden Polypeptiden unbekannter bzw. bekannter 3D-
10 Struktur gemäß (a) stellt eine zentrale Aufgabe für das Homologie-Modelling dar. Hierbei werden die ausgerichteten korrespondierenden Aminosäuren verschiedenen Kategorien zugeordnet, nämlich Positionen mit identischen, ähnlichen, entfernt ähnlichen oder unähnlichen Aminosäuren.
15 Besondere Berücksichtigung müssen beim "Alignment" gegebenenfalls Insertionen oder Deletionen zwischen den zu vergleichenden Primärsequenzen finden. Die gemäß Verfahrensschritt (c) erfolgende Optimierung der auf der Grundlage der bekannten 3D-Struktur modellierten Zielstruktur
20 kann durch die Methoden der Molekulardynamik-Simulation "molecular dynamics" oder durch Energieminimisierung (z.B. Sybil Base von Tripos, s. Zitat a.a.O.) erfolgen.

25 Besonders bevorzugt ist ein erfindungsgemäßes Verfahren zur Aufklärung von Kristallformen unbekannter Struktur dann, wenn es sich bei der Kristallform bekannter Struktur um ein Hop-Protein oder ein mit Hop verwandtes Protein, insbesondere eines der in Figur 3 genannten Proteine
30 bzw. Proteinabschnitte, handelt und die Kristallform eines Hop-Isoproteins oder eines anderen verwandten Proteins z.B. durch "Molekulares Ersetzen" oder durch "Homologie-Modelling" aufgeklärt werden soll. Gleichfalls kann auf der Basis einer erfindungsgemäßen bekannten Hop-
35 Kristallform des einen Wirtsorganismus eine Kristallform für einen Hop-Komplex, gegebenenfalls mit einem Liganden, von einem anderen Wirtsorganismus ermittelt werden.

Damit also können Strukturkoordinaten von erfindungsgemäßen Kristallformen durch Homologie-Modelling als Strukturmodelle für sequentiell homologe Polypeptide unbekannter 3D-Strukturen dienen. Im Rahmen des Homologie-Modellings kommen Programmpakete zum Einsatz, insbesondere kann mit dem Insight II Modellierungspaket (Molecular Simulations Inc.) ein derartiges Modelling durchgeführt werden. Die Beschreibung des Programmpakets Insight II wird vollumfänglich in die vorliegende Offenbarung, insbesondere in Hinblick auf das Homologie-Modelling, einbezogen.

Ein weiterer Gegenstand der vorliegenden Erfindung sind Verfahren zur Identifizierung von Verbindungen, die die Wechselwirkung zwischen einem Polypeptid, enthaltend mindestens eine Aminosäuresequenz eines TPR-Strukturmotivs, vorzugsweise eines TPR-Strukturmotivs eines Hop-Proteins, oder eines Derivats einer solchen Aminosäuresequenz und einem Chaperon-Protein blockiert, wobei hierfür (a) die unbekannte 3D-Struktur eines derartigen Polypeptids, das einem Polypeptid in einer erfindungsgemäßen Raumform entspricht, nach einem in den Ansprüchen 50 bis 52 beschriebenen Verfahren ermittelt wird und dann (b) mit Hilfe eines der in Zusammenhang mit den Ansprüchen 41 bis 48 beschriebenen Verfahren eine Verbindung mit der Fähigkeit, als Inhibitor der Wechselwirkung eines Chaperon-Proteins mit einem Polypeptid zunächst unbekannter und dann gemäß (a) aufgeklärter 3D-Struktur zu wirken, bestimmt wird. Hierbei wird es sich typischerweise um Verbindungen handeln, die entweder eine Bindung mit dem TPR-Domänen-Protein, vorzugsweise in dem für die Bindung mit dem physiologischen Bindungspartner maßgeblichen Bindungsbereich, eingehen, und so die Interaktion auf Grund ihrer Komplementarität zum TPR-Bindungsbereich blockieren, oder aber um Verbindungen, die den Bindungsbereich der TPR-Domäne simulieren und damit komplementär zur Bindungsstelle des Chaperon-Proteins sind.

Schließlich wird im Rahmen der vorliegenden Erfindung auch die Verwendung von Inhibitoren und/oder gegebenenfalls Aktivatoren der physiologischen Aktivität von Hop-Protein oder einem der in Figur 3 genannten Proteine, insbesondere von humanem Hop-Protein, nach einem der Ansprüche 28 bis 37 bzw. erhalten oder erhältlich aus einem Verfahren nach einem der Ansprüche 41 bis 48 zur Herstellung eines Arzneimittels, zur Verwendung als Arzneimittel oder als Wirkstoff, der in einer pharmazeutischen Zusammensetzung enthalten ist, offenbart. In einer pharmazeutischen Zusammensetzung kann ein erfindungsgemäßer Inhibitor oder gegebenenfalls Aktivator mit mindestens einem weiteren Wirkstoff kombiniert sein und/oder die pharmazeutische Zusammensetzung bzw. der Inhibitor als Wirkstoff wird als Arzneimittel in eine dem Fachmann geläufigen Formulierung eingearbeitet sein. Die Formulierung wird dabei insbesondere vom Verabreichungsweg abhängen. Dieser kann oral, rektal, intranasal oder parenteral, insbesondere subkutan, intravenös, oder intramuskulär, sein. Pharmazeutische Zusammensetzung, die einen derartigen Inhibitor und/oder Aktivator enthalten, können die Verabreichungsform eines Puders, einer Suspension, einer Lösung, eines Sprays, einer Emulsion oder einer Creme haben.

Ein erfindungsgemäßer Inhibitor oder gegebenenfalls Aktivator kann mit einem pharmazeutisch akzeptablen Trägermaterial mit neutralem Charakter (wie z. B. wässrigen oder nicht-wässrigen Lösungsmitteln, Stabilisatoren, Emulgatoren, Detergentien und/oder Additiven und gegebenenfalls weiteren Farb- oder Geschmacksmitteln kombiniert sein. Die Konzentration eines erfindungsgemäßen Inhibitors und/oder Aktivators in einer pharmazeutischen Zusammensetzung kann zwischen 0,1% und 100% variieren, abhängig insbesondere von dem Verabreichungsweg. Eine pharmazeutische Zusammensetzung oder ein Arzneimittel, enthaltend einen erfindungsgemäßen Inhibitor oder gegebenenfalls Aktivator der Interaktion zwischen Proteinen mit TPR-Domänen und Chaperon-Proteinen, insbesondere Hsp70 oder

Hsp90, kann insbesondere zur Behandlung von Tumorerkrankungen, Autoimmunerkrankungen, Immunsuppression, Behandlung von Entzündungserkrankungen, GVHD oder zur Behandlung von Virusinfektionen dienen.

5 Weitere erfindungsgemäße Gegenstände sind DNA-Sequenzen, die für eines der Proteine TTC1, TTC2, TTC3, TTC4, IRSP, SGT oder KIA0719 codieren, bzw. DNA-Sequenzen, die für die in Figur 3 dargestellten Teilsequenzen der vorgenannten Proteine codieren. In diesem Zusammenhang wird dabei
10 auch auf die Figur 3 bzw. auf die Beschreibung dieser Figuren verwiesen. Insbesondere die in Figur 3 genannten weiteren Proteine mit TPR-Domänen, vor allem die Sequenzen/Teilsequenzen der Proteine TTC1, TTC2, TTC3, TTC4, IRSP, SGT und KIAA0719 werden vorliegend erstmals als
15 Protein mit TPR-Domänen und mit der Fähigkeit an Chaperon-Proteine zu binden, insbesondere an Hsp70 und/oder Hsp90, offenbart. Darüber hinaus werden die Aminosäuresequenzen der vorgenannten sieben Proteine, insbesondere die Teilsequenzen gemäß Fig. 3 als Sequenzen mit typischerweise Co-Chaperon-Funktion offenbart. Hieraus ergibt sich als weiterer Erfindungsgegenstand die Verwendung dieser DNA- bzw. Aminosäuresequenzen zur Herstellung eines Arzneimittels, insbesondere zur Behandlung von Fehlfunktionen im Zusammenhang mit Mißfaltungen von Protei-
20 nen, zellpathologischen Zuständen des Chaperon-Systems, bspw. Über- oder Unterfunktionen des Chaperon-Systems. Insbesondere Teilsequenzen, vor allem die TPR-Domänen der vorgenannten Proteine bzw. Abschnitte oder Fragmente derartiger TPR-Domänen können als Inhibitoren der physiologischen Bindungsfunktionen dieser insoweit als Co-Chaperons wirkenden Proteine eingesetzt werden.
25
30

Anlagen A1 bis A4 sind Bestandteil der Offenbarung der vorliegenden Patentanmeldung.

Die vorliegende Erfindung wird durch die nachfolgenden Figuren näher erläutert.

Die Figur 1 umfaßt die Figuren 1A, 1B und 1C.

5 Figur 1A zeigt hierbei die sequenzielle Grobstruktur eines Hop-Proteins, und zwar unter Berücksichtigung der drei im Hop-Protein vorhandenen TPR-Domänen, nämlich TPR1, TPR2A und TPR2B. Figur 1A gibt auch die Domänen-
10 grenzen wieder. Die Domäne TPR1 erstreckt sich definiti-
onsgemäß bis zur Aminosäure 118, die Domäne TPR2A liegt
zwischen Aminosäure 223 und Aminosäure 352 und die TPR-
Domäne TPR2B zwischen Aminosäure 353 und 477.

15 Figur 1B zeigt eine Auftragung der kalorimetrischen isothermischen Titrationsmessungen zur Bestimmung der Wechselwirkung zwischen der TPR1-Domäne des Proteins Hop mit der C-terminalen 25kDa-Domäne von Hsp70 (C70). Im oberen Teil der Darstellung findet sich in inkrementeller Auf-
20 tragung die Wärmefreisetzung nach Titration von C70
(180 μ M) mit TPR1 (3mM) bei 25°C. Im unteren Teil sind die kalorimetrischen Ergebnisse nach Integration und normalisiert auf die Menge von injiziertem TPR1 dargestellt. Die
25 Kurve wurde an ein Bindungsmodell der Stöchiometrie 1:1 zwischen den Bindungspartnern angepaßt. Bestimmt wurden
folgende Werte: $K_D = 15 \mu$ M, Stöchiometrie $N = 0,87$.

In Figur 1C sind die thermodynamischen Bindungskonstanten (K_D) bei der Wechselwirkung von TPR1 mit C70 und solchen
30 Peptiden, die die letzten 12 Aminosäurereste von Hsp70
und Hsc70 (in der oberen Darstellung) umfassen, und für die Bindung von TPR2A an C90 und an ein Hsp90-Pentapeptid
(in der unteren Darstellung) dargestellt. Die Titrations-
wurden bei 25°C durch Injizieren von Proteinen oder Pep-
tiden in eine Lösung, die TPR1 enthielt, durchgeführt.
35 Die stöchiometrischen Konstanten (N) lagen typischerweise
zwischen 0,9 und 1,1. Die ITC-Messungen erwiesen sich als
bestens reproduzierbar mit Standardabweichungen von unge-
fähr 5 bis 10% bei dreifacher Wiederholung der Messungen.

In Fig. 2 finden sich die Darstellungen A bis H, wobei es sich bei den Figuren A, B, E und F um schematisierte sog. "Ribbon"-Darstellungen handelt. Das Rückgrat der TPR-Domäne ist cyanofarben (TPR1) oder in Magenta (TPR2A) gehalten, wobei sowohl in Fig. 2A als auch in Fig. 2E die gebundenen Peptide als stäbchenförmige Modelldarstellungen in Pink angegeben sind. Die N- und C-Termini der TPR-Domänen bzw. der gebundenen Peptide sind mit den entsprechenden Buchstaben N und C markiert. Die in jedem TPR-Strukturmotiv auftretenden Helices A und B der drei aufeinanderfolgenden TPR-Struktur motive sind ebenso dargestellt wie die flankierende Helix C. Dabei zeigen die Figuren 2A und 2E die wiegenförmigen TPR1- und TPR2-Domänen.

Die Figuren 2B und 2F haben denselben Darstellungsgegenstand wie die Figuren 2A und 2E, wobei in den Figuren 2B und 2F die Komplexe aus TPR1 mit gebundenem Peptid und TPR2A mit gebundenem Peptid um jeweils 90° gedreht sind. Nunmehr ist der aus den beiden Carboxylat-Gruppen bestehende Anker des Peptids in Richtung auf den Betrachter gerichtet. Die Figuren 2C und 2G stellen (2Fo-Fc)-Elektronendichtekarten dar, die für den Peptidbereich mit Hilfe des Endmodells berechnet wurden, wobei das Peptid hieraus weggelassen wurde. Die Figuren 2D und 2H sind Darstellungen des elektrostatischen Potentials von TPR1 und TPR2A, das auf die zugängliche molekulare Oberfläche so modelliert wurden, wie es sich mit Hilfe des Programms GRASP berechnen und visuell darstellen ließ. Entsprechende nähere Erläuterungen finden sich bei Nicholls et al. (Biophysical Journal 64, A166). In rot sind die negativ geladenen, in blau die positiv geladenen und in grau die neutralen Bereiche gekennzeichnet. Die gebundenen Peptide finden sich in einer stabförmigen Darstellung ebenfalls dargestellt.

In Figur 3 wird ein sequenzspezifischer Vergleich ("Alignment") der TPR-Domänen von solchen Proteinen ge-

zeigt, die entweder an Hsp70 oder Hsp90 binden. Konser-
vierte Aminosäurereste, die an elektrostatischen Wechsel-
wirkungen mit dem EEVD-Motiv des Liganden beteiligt sind,
sind in blau markiert, während Aminosäurereste, die in
5 hydrophober oder in van-der-Waals-Wechselwirkung mit dem
Liganden stehen, rot gekennzeichnet sind. Jene Aminosäu-
rereste, die im Fettdruck dargestellt sind, sind Bestand-
teil der TPR-Konsensus-Sequenz und sind auf Grund der
Packung der verschiedenen α -Helices von benachbarten TPR-
10 Strukturmotiven konserviert. Alle Sequenzen wurden aus
der Datenbank GenBank entnommen und sind menschlichen Ur-
sprungs, abgesehen von CNS1 und TOM70, die aus *S. cerevi-*
siae bzw. *N. crassa* stammen. Bei TPR1 und CHIP handelt es
sich um Hsp70-bindende TPR-Domänen. Hsp90-bindende TPR-
15 Domänen sind TPR2A, PP5, FKBP51, FKBP52, CYP40, TOM34,
TOM70 und CNS1. Ein Ligand für die TPR-Domäne TPR2B des
Hop-Proteins ist bislang nicht identifiziert worden.

Die weiteren Sequenzen TTC1 und TTC2 (diese treten in
20 Wechselwirkung mit Neurofibromin), TTC3 (liegt in einer
genomischen Region, die an der Pathologie des Down-
Syndroms beteiligt ist), TTC4 (ist in einem Bereich der
regelmäßig bei Sporadischem Brustkrebs deletiert ist),
IRSP (ein Protein, das in Zusammenhang mit Infertili-
25 tätsserscheinungen steht) und SGT (kleines glutaminreiches
TPR-Protein, das mit dem nicht-strukturellen NS1-Protein
des Parvovirus H-1 interagiert) haben gleichfalls Sequen-
zen mit TPR-Domäneneigenschaften, die an Hsp70 und/oder
Hsp90 binden können. Letzteres gilt auch für das mensch-
30 liche Protein KIAA0719, dessen physiologische Funktion
unbekannt ist.

Figur 3A gibt die Aminosäuresequenzen einer beispielhaf-
ten Auswahl von TPR-Strukturmotiven an, die in Polypepti-
35 den auftreten können, auf deren Raumform die Ansprüche 1
bis 22 gerichtet sind. Die in Figur 3A wiedergegebenen
Aminosäuresequenzen treten in humanen Hop-Proteinen auf.
Die Sequenzen (1), (4) und (7) sind Bestandteile der TPR-

Domäne TPR1, die Sequenzen (2), (5) und (8) sind Bestandteile der TPR-Domäne TPR2A und die Sequenzen (3), (6) und (9) Bestandteile der TPR-Domäne TPR2B, jeweils vom Hop-Protein. Die räumlichen Strukturen der Sequenzen (1), (4) und (7) können der Figur 3C entnommen werden, die die Strukturkoordinaten der TPR-Domäne TPR1 ohne Komplexbildung mit einem Liganden wiedergibt. Die TPR-Strukturmotive (1), (4) und (7) können in Figur 3C oder 3D anhand ihrer Sequenz (Strukturkoordinaten gelistet für Atome vom N-Terminus zum C-Terminus (Arg118), für die Elektronendichte beobachtet werden kann), zugeordnet werden (s. hierzu auch Figur 3). Analoges gilt für die räumlichen Strukturen der TPR-Strukturmotive (2), (5) und (8), die aus Figur 3E entnommen werden können.

Figur 3B stellt die Aminosäuresequenzen der drei in Hop-Proteinen auftretenden TPR-Domänen TPR1, TPR2A und TPR2B dar. Deren räumliche Struktur ist durch die atomaren Strukturkoordinaten gleichfalls den Figuren 3C, 3D und 3E zu entnehmen.

Figur 3C gibt die Strukturkoordinaten der TPR-Domäne TPR1 (ohne Komplexbildung mit einem Liganden) wieder, soweit für die Aminosäuren der Sequenz Elektronendichte beobachtet werden konnte. In der Auflistung der atomaren Strukturkoordinaten sind die Strukturkoordinaten der Sequenzen (1), (4) und (7) gemäß Figur 3A enthalten. Angaben zur Strukturanalyse sind auf den Seiten 1 und 2 (von 39) der Figur 3C enthalten.

Figur 3D listet die Koordinaten für die Atome der TPR1-Domäne von Hop im Komplex mit dem Liganden GASSGPTIEEVD auf. Physikalische Angaben zur Durchführung der Röntgenstrukturanalyse ebenso wie zum kristallisierten Polypeptid sind auf den Seiten 1 bis 6 der Figur 3D wiedergegeben.

Figur 3E stellt die Koordinaten der TPR-Domäne TPR2A des Hop-Proteins im Komplex mit dem Liganden MEEVD dar. Die

in Figur 3A bezeichneten TPR-Strukturmotive (Sequenzen (2), (5) und (8) sind gleichfalls in ihrer räumlichen Struktur in Fig. 3E enthalten). Die Seiten 1 bis 6 von Figur 3E geben Information zum kristallisierten Polypeptid und zur Durchführung der Röntgenstrukturanalyse wieder. Für die Figuren 3C, 3D und 3E gilt, daß die Struktur der terminalen, insbesondere C-terminalen Aminosäuren der TPR-Domänen, aufgrund der typischen Beweglichkeit dieser endständigen Aminosäuren nicht bestimmt werden kann.

Figur 4 ist eine schematische Darstellung der Wechselwirkung, die zwischen einer TPR-Domäne und einem komplementären Peptid bestehen können. Figur 4A stellt den TPR1/Peptid-Komplex dar, während Figur 4B den TPR2A/Peptid-Komplex zeigt. Die Farben für den Aminosäurerest von TPR1, TPR2A und der jeweiligen Peptide entsprechen der in Figur 2 dargestellten farblichen Kennzeichnung.

Figur 5 ist eine Überlagerung der beiden TPR/Peptid-Komplexe. Die Überlagerung der sog. Doppel-Carboxylat-Klammer der beiden TPR1/ und TPR2A/Peptid-Komplexe führt zu einer strukturellen Kongruenz der Seitenketten, die an den Peptidkontakten beteiligt sind und auch von Teilen der gebundenen Peptide. Der TPR1-Komplex ist in magenta gehalten, der TPR2A-Komplex ist in cyano dargestellt. Die Aminosäurereste der Doppel-Carboxylat-Klammer und die N- und C-Termini der Peptide sind markiert.

Figur 6 ist eine Auftragung der thermodynamischen Analyse der Wechselwirkung von TPR1 und TPR2A mit den C-terminalen Sequenzen von Hsp70 und Hsp90. Figur 6A stellt die Bindungskonstanten (K_D) für die Wechselwirkung von TPR1 mit EEVD-Peptiden dar, die mit Hilfe der ITC-Messungen (vgl. Fig. 1) ermittelt wurden. Figur 6B behandelt die Bindung von TPR2A an EEVD-Peptide. Die Sequenzfolge GSGSGPTIEEVD entspricht den 12 C-terminalen Aminosäureresten von Hsc70. GDDDTSRMEEVD entspricht den 12 C-terminalen Aminosäureresten von Hsp90. Die Titrations

wurden bei 25°C durch das Injizieren von Peptiden, die in Puffer G bei einer Konzentration von 7,5 mM bis 15 mM gelöst waren, in eine Lösung, die die TPR1-Domäne (450 μ M - 950 μ M) im Puffer G enthielt, durchgeführt. Die Stöchiometrie-Konstanten (N) lagen typischerweise zwischen 0,9 und 1.1.

Figur 7 stellt die Sequenzkonservierung der C-Termini von Hsp70/Hsc70- und Hsp90-Chaperons dar. Figur 7A zeigt die Aminosäurekonservierung der cytosolischen Varianten von eukaryontischen Hsp70- und Hsc70-Protein, wobei 83 Sequenzen analysiert wurden. Die Konservierung der am häufigsten auftretenden Aminosäure an der jeweiligen Position ist in % angegeben. Jene Aminosäuren, die dem strukturell geordneten Peptidbereich angehören, sind im Fett-
druck markiert. In Figur 7B wird in analoger Weise die Aminosäurekonservierung der cytosolischen Varianten des eukaryontischen Hsp90-Proteins dargestellt, wobei 138 Sequenzen analysiert wurden. Die letzten fünf Aminosäuren, die für die TPR-Bindung maßgeblich sind, sind im Fett-
druck markiert.

Figur 8 zeigt die Überlagerung des TPR1/Peptids-Komplexes mit dem 14-3-3-Peptidkomplex. Figur 8A ist eine Darstellung des "Alignments" der korrespondierenden α -Helices und der gebundenen Peptide. Der TPR1-Komplex ist in magenta und der 14-3-3-Komplex ist in grau gehalten. N- und C-Termini der Domänen und der gebundenen Peptide sind markiert. Figur 8B stellt eine Überlagerung der sog. Doppel-Carboxylat-Klammer von TPR1 mit den entsprechenden Aminosäuren der 14-3-3-Domäne dar.

Die vorliegende Erfindung wird durch die nachfolgenden Ausführungsbeispiele näher erläutert.

Hierzu wurden die TPR-Domänen TPR1 und TPR2A des Hop-Proteins (Primärsequenzen unter der Bezeichnung (1) und

(2) in Figur 3B angegeben) ohne Liganden (Figur 3C) bzw. im Komplex mit Polypeptidliganden kristallisiert und nachfolgend durch Röntgenkristallographie hochaufgelöste Kristallstrukturen der drei Kristalle erhalten.

5

1. Protein- und Peptidpräparation

Die Codons 1-118 (TPR1) und 223-352 (TPR2A) von humanem Hop-Protein wurden im richtigen Leseraster in die EheI-Schnittstelle des Plasmids pPROEx HTa (von der Fa. Life Sciences) zur Expression in E.coli BL21 (DE3) als Fusionsproteine mit abtrennbaren N-terminalem Hexahistidin-"Tags" kloniert. Die löslichen Proteine wurden mit Hilfe chromatographischer Verfahren auf Ni-NTA (von der Fa. Qiagen) und Superdex 200 (von der Fa. Pharmacia) gereinigt. Die His-Tags wurden unter Verwendung von TEV-Protease abgetrennt, wobei ein zusätzlicher Glycinrest vor dem N-Terminus verblieb. Die Proteine wurden durch Ultrafiltration bis zu einer Konzentration von 40 mg/ml aufkonzentriert. Für die Strukturbestimmung der Domäne TPR2A wurde eine Selenomethionin-markierte Form durch eine Expression im E.coli-Stamm B834 (DE3) hergestellt. Ein Selenomethionin-markiertes Peptid (die C-terminalen fünf Aminosäuren von Hsp90 mit der Sequenz MEEVD (Ein-

25 Buchstaben-Code)) wurde für die Co-Kristallisierung verwendet. Der Einbau der Methionine wurde durch Massenspektrometrie bestätigt. Das C-terminale Fragment von menschlichem Hsp70 (C70, Codons 382-641) wurde nach der gleichen Vorgehensweise kloniert, exprimiert und gereinigt.

30 Die C-terminale Domäne von menschlichem Hsp90 (C90, Codons 625-732) wurde, wie bei Young et al. (1998, J. Biol. Chem. 273, 18007-18010) beschrieben, exprimiert und gereinigt.

35 Für die Synthese von Ac-(Se)Met-Glu-Glu-Val-Asp-OH wurde das L-Selenomethionin in Fmoc-(Se)Met-OH durch Reaktion mit Fmoc-OSu unter Standardbedingungen umgewandelt (Kristallisierung aus Ethylacetat/Hexan). Das Tetrapeptid H-Glu(OtBu)-Glu(OtBu)-Val-Asp(OtBu)-Resin wurde nach

Standard-Fmoc/HBTU/HOBt-Festphasenprotokollen auf Wang-Resin (von der Fa. Bachem, Bubendorf) synthetisiert. Das Fmoc-(Se)Met-OH wurde in einem zweifachen Überschuß an das Peptidresin mit HBTU/HOBt/DIEA (1:1:2) zweifach gekoppelt. Nach Piperidin-vermittelter Abspaltung der Fmoc-Schutzgruppe wurde die N-terminale Acetylierung mit einem achtfachen Überschuß von Ac₂O in der Gegenwart von DIEA durchgeführt. Der Resinabtrennungs- und Deprotektions-

schritt wurde mit Argon-gesättigtem TFA/TIS/H₂O (93,5:5:1,5) bei Raumtemperatur für 90 Minuten unter Argonatmosphäre durchgeführt. Das Resin wurde abfiltriert und das Produkt mit Methyltert-butyl-ether/Hexan präzipitiert. Das Rohpeptid wurde durch präparative RP-HPLC (Elution: linearer Gradient von 0,1% wäßriger TFA und 0,08% TFA in CH₃CN) gereinigt. Das Produkt wurde nach Lyophilisierung erhalten. Alle anderen Peptide wurden mit acetylierten N-Termini unter Verwendung von Festphasen-FMOC-Chemie synthetisiert.

2. Kristallisierung und Datensammlung

Die Kristalle des Polypeptids, das der TPR1-Domäne von Hop entspricht (Figur 3B, Sequenz (1)), im Komplex mit einem Peptid (GASSGPTIEEVD, C-terminales Dodekamer von Hsp70) wurden bei 20°C durch die Technik des "hängenden Tropfens" mit Hilfe von Dampfdiffusionsverfahren aufgezogen. Gleiche Volumina (1,5 µl) des Protein-Peptid-Komplexes (Protein:Peptid = 1:1,3) wurden bei einer Konzentration von 20 mg/ml in 15 mM HEPES (pH 7,5) mit einer Reservoir-Lösung gemischt, die 100 mM TRIS (pH 8,5), 24% (w/v) PEG MME 2000, 10 mM NiCl₂ und 15% (w/v) Xylitol enthielt. Die Kristallisierung wurde mit Hilfe des "Microseedings" verbessert, wobei die Kristalle ihre volle Größe (typischerweise 150x150x70 µm³) innerhalb von zwei Wochen erreichten. Die Kristalle wurden dann blitzartig in flüssigem Stickstoff gekühlt und bei 100 K während der Datensammlung konserviert. Hierfür wurde ein Oxford Cryostream-Gerät eingesetzt. Die Kristalle gehörten

zur Raumgruppe $P4_1$ ($a = 75,47 \text{ \AA}$, $c = 42,89 \text{ \AA}$) mit zwei Molekülen pro asymmetrischer Einheit und einem Lösungsmittelanteil von 45%. Vier Nickelatome und vier TRIS-Moleküle wurden in der Struktur aufgefunden. Die hochaufgelösten Datensätze wurden an der Strahlenquelle X12B der national Synchrotron Light Source in Brookhaven unter Verwendung eines ADSC Quantum-4 CCD-Detektors gesammelt. Weitere Einzelheiten der Datensammlung sind der Tabelle 1 zu entnehmen.

Die Kristalle von TPR2A (Aminosäuresequenz wie in Figur 3B für das mit (2) bezeichnete Polypeptid angegeben) wurden im Komplex mit einem Pentamer (MEEVD, entsprechend den fünf C-terminalen Aminosäuren des Chaperon-Proteins Hsp90) wie oben beschrieben aufgezogen. Hierzu wurden gleiche Mengen ($1,8 \mu\text{l}$) des Protein-Peptid-Komplexes (Protein:Peptid = 1:1,3) bei einer Konzentration von 15 mg/ml in 50 mM TRIS (pH 7,5), 2 mM DDT mit Reservoir-Lösung, die 100 mM TRIS (pH 8,5), 20% (w/v) PEG MME 2000, 5 mM NiCl_2 und 10% (w/v) Xylitol enthielt, gemischt. Die Kristalle waren nach einer Woche nachweisbar und erreichten ihre volle Größe (typischerweise $100 \times 50 \times 50 \mu\text{m}$) innerhalb von drei Wochen. Es wurde festgestellt, daß die Nickelionen und das Peptid für die Kristallisierung entscheidend waren. Ein in hohem Maße strukturell fixiertes Nickelion wurde in der Struktur aufgefunden, wobei es einen Kristallkontakt vermittelt. Es wurde für die Ermittlung der Phaseninformation verwendet. Die Kristalle gehörten zur Raumgruppe C2 mit einem Molekül pro asymmetrischer Einheit und einem Lösungsmittelanteil von 40%. Der native Datensatz wurde bis zu einer Auflösung von $1,9 \text{ \AA}$ an der Strahlenquelle ID14-3 beim ESRF unter Verwendung eines MarCCD-Detektors gesammelt. Die multiplen anisomorphen Diffraktionsdaten (MAD) von markiertem TPR2A-Peptid-Komplex wurden an der MPG/GBF-"Wiggler"-Strahlenquelle BW6/DORIS am DESY unter Verwendung eines MarCCD-Detektors aufgezeichnet. Die Datensätze wurden um die Absorptionskanten von Ni herum (Ni1:peak, Ni2:inflection) und

Se(Se1:peak, Se2:inflection) anhand eines einzigen Proteinkristall gesammelt. Alle Datensätze wurden mit Hilfe des HKL Software-Programmpakets (Otwinowski und Minor, 1997, Macromolecular Crystallography, Pt A, Seiten 307-326) prozessiert. Weitere Einzelheiten zur Datensammlung sind der Tabelle 2 zu entnehmen.

3. Strukturbestimmung und Strukturverfeinerung

Die Struktur des TPR1-Komplexes wurde durch das molekulare Ersetzen ("molecular replacement") unter Verwendung des Programms Amore, das Bestandteil der CCP4 Programmsuite (Bailey, 1994, Acta Crystallographica Section D-Biological Crystallography, 50, 760-763) ist, gelöst. Teile der zuvor bestimmten Kristallstruktur von TPR1L (Aminosäuren 1-140) dienten als Suchmodell. Der TPR1-Peptid-Komplex wurde mit dem Programm CNS (Brünger et al., 1998, Acta Crystallographica Section D, Biological Crystallography, 54, 905-921) unter Verwendung aller Diffraktionsdaten zwischen 20 und 1,6 Å Auflösung verfeinert, wobei 10% der Daten für die Kreuzvalidierung (s. Tabelle 1) ausgeschlossen wurden. Alle Verfeinerungsschritte wurden vollzogen, ohne von nicht-kristallographischer Symmetrie Gebrauch zu machen. Elektronendichte konnte bei den beiden kristallographisch unabhängigen TPR1-Domänen in der asymmetrischen Einheit (Kette A und Kette B) für die Aminosäurereste von A2 bis A118 und B1 bis B115 beobachtet werden. Aufgrund der Beweglichkeit wurden die Reste A2, B1, B2 und B110 als Alanine modelliert. Die Positionen der Peptide wurden aus einer Differenzelektronendichtekarte ermittelt. In beiden Fällen konnten nur die letzten acht Aminosäuren GPTIEEVD des Peptids einer Elektronendichte zugeordnet werden. Die Differenzelektronendichtekarte erlaubte auch die Identifizierung der vier Nickelatome (zwei pro Monomer) und von vier TRIS-Molekülen (zwei pro Monomer). Zwei Nickelbindungsstellen wurden am Histidin 36 jeweils für die Ketten A und B lokalisiert. Die Okkupanz wurde manuell auf 0,5 eingestellt, um die Temperaturfaktoren an jene der gebun-

denen Histidine anzupassen. Zwei vollständig besetzte Positionen wurden am Histidin 101 (für die Ketten A und B) lokalisiert. Jedes Nickelatom, das an das Histidin gebunden ist, ist zusätzlich mit zwei TRIS-Molekülen komplexiert.

Das Endmodell, das 1960 Proteinatome, 36 Heteroatome und 245 Lösungsmittelmoleküle enthält, konvergierte bei einem R-Faktor $R_{\text{work}} = 18,2\%$ ($R_{\text{free}} = 21,6\%$). Die mittlere Standardabweichung für die Bindungslängen beträgt $0,008 \text{ \AA}$ und für die Bindungswinkel $1,3^\circ$. In der vorhergehenden Beschreibung der Struktur wurde nur eine der beiden Ketten im Komplex mit dem gebundenen Peptid (Kette A bzw. Kette C für das Peptid) der beiden in der asymmetrischen Einheit enthaltenen Ketten A und B behandelt.

Für die Ermittlung der TPR2A-Struktur (Tabelle 2) wurden die MAD-Datensätze auf eine ungefähr absolute Skala gesetzt und als ein spezieller Fall von MIR-Daten behandelt, wobei verschiedene Programme aus der CCP4 Programmsuite (CCP4, 1994) eingesetzt wurden. Die Position eines Nickelatoms wurde durch Analyse von einer anomalen Differenz-Patterson-Karte aus den Daten bei einer Wellenlänge von maximal f_{Ni} (Ni1) bestimmt. Diese Nickelbindungsstelle wurde dann verwendet, um die MAD-Phasen mit Hilfe von MLPHARE (CCP4, 1994) zu berechnen. Diese Phasen wurden dann weiterverwendet, um die beiden Selen-Bindungsstellen aus der anomalen Differenz-Fourier-Karte, die mit Hilfe der bei maximal f_{Se} (Se1) gewonnenen Daten berechnet wurden, zu identifizieren. Zur abschließenden Phasenermittlung wurde die Wellenlänge des Inflektionspunkts von Nickel (Ni2) als nativer Datensatz verwendet und die drei anderen Wellenlängen (Ni1, Se1, Se2) wurden als separate Derivate behandelt. Die Phasen wurden im Auflösungsreich zwischen $17,0\text{-}2,1 \text{ \AA}$ berechnet und ihr anfänglicher "mean figure of merit" von $0,74$ wurde durch die Methode des "solvent flattening" und "histogram matching" unter Verwendung des Programms DM (CCP4, 1994) verbessert. Die erhaltene Elektronendichtekarte entsprach hoher Qualität

und erlaubte es, mit Hilfe von WARP (Perrakis et al, 1997) ungefähr 90% der Endstruktur zuzuordnen. Die Atommodelle wurden überprüft und unter Verwendung des Programms O (Jones et al., 1991, Acta Crystallographica, Section A 47, 110-119) weiter verbessert. Die Verfeinerungen wurden mit Hilfe des Programms CNS (Brünger et al, 1998, Acta Crystallographica, Section D, Biological Crystallography 54, 905-921) gegen den nativen Datensatz unter Verwendung aller Diffraktionsdaten zwischen 10 und 1,9 Å Auflösung (ausgeschlossen 10% der Daten für die Kreuzvalidierung) ausgeführt. Die Aminosäuren Lys223 bis Gln349 (TPR2A-Domäne) wurden der Elektronendichte zugeordnet, genauso wie die Aminosäuren Met-4 bis Asp0 des Pentapeptids. Aufgrund ihrer Beweglichkeit wurden die Reste A291 bis A294 und A348 als Alanine modelliert. Die Nickel-Bindungsstelle, die im Rahmen der Phasenermittlung verwendet wurde, erwies sich als Brücke eines Kristallkontakts von His247 zum His321 und Lys325 aus dem symmetrieverwandten Molekül.

Das Endmodell enthielt 1086 Proteinatome (44 für das Peptid), 1 Heteroatom und 152 Lösungsmittelmoleküle, die bei einem R-Faktor von $R_{\text{work}} = 18,1\%$ ($R_{\text{free}} = 21,9\%$) für alle Daten ohne irgendeinen Sigma-Grenzwert konvergierten. Die Standardabweichung für die Bindungslänge betrug 0,008 Å und für die Bindungswinkel 1,2°. Alle Reste sind in den favorisierten oder in den zumindest allgemein erlaubten Bereichen der Ramachandran-Auftragung angesiedelt, wie mit Hilfe des Programms PROCHECK (Laskowski et al., 1993) berechnet.

4. Isotherme Titrationskalorimetrie (ITC)

Die Bindung von Proteinfragmenten und Peptiden an die TPR-Domänen wurde mit Hilfe der isothermen Titrationskalorimetrie (Wiseman et al., 1989. Anal. Biochem. 179, 131-137) unter Verwendung eines MicroCal MCS-Titrationskalorimeters (MicroCal Inc., Northhampton, USA) gemessen. 40-50 Aliquots von 5 µl Peptidlösung (7,5mM - 15mM) wurden bei 25°C durch

Injektion in 1,36 ml TPR1 (TPR2A)-Lösung (450 μ M-950 μ M) in die Kammer titriert. Alternativ wurde eine Lösung von 3 mM TPR1 (TPR2A) in 180 μ M C70 (C90)-Lösung in der Kammer titriert. Die Peptide wurden aufgelöst in und die Proteine dialysiert gegen den Puffer G (25 mM HEPES, pH 7,5, 100 mM KAc, 5 mM MgAc₂). Die Injektionen wurden typischerweise über die Sättigungsgrenzen hinaus fortgesetzt, um die Wärme der Ligandenauflösung bestimmen zu können. Nach der Subtraktion der Auflösungswärme wurden die kalorimetrischen Daten analysiert, wobei eine Bewertungssoftware, die durch den Hersteller zur Verfügung gestellt wird (Version 2.9; MicroCal Software, Inc.), verwendet wurde.

Ergebnisse der Ausführungsbeispiele

1.

Durch beschränkte Proteolyse wurden drei definierte Domänen von menschlichem Hop-Protein identifiziert: TPR1, TPR2A und TPR2B (Figur 1A). Bei allen drei Domänen handelt es sich um TPR-Domänen.

2.

Durch die isothermischen kalorimetrischen Messungen wurde gezeigt, daß auch ein 25kDa-Fragment von menschlichem Hsp70 (C70) weiterhin die Substratbindungsdomäne aufweist und daß der authentische C-Terminus von Hsp70, gebunden an die Domäne TPR1 mit einer Affinität von 15 μ M und einem Stöchiometrie-Faktor (N) nahe bei 1 an die Domäne TPR1 bindet (Figuren 1B und 1C). Die gleichen Affinitäten wurden für ein Dodekamer mit Aminosäuresequenzen der C-Termini von Hsp70 und Hsc70, die nahezu identisch sind, als Liganden erhalten (Figur 1C). Ein 12kDa-Fragment von Hsp90 (C90), das die Dimerisierungsdomäne und den authentischen C-Terminus von Hsp90 (Aminosäuren 629-732) einschließt, bindet an die Domäne TPR2A mit einer Affinität von 6 μ M und einem Stöchiometrie-Faktor nahe bei 1 (Figur 1C). Ein Peptid, das nur die letzten fünf Aminosäurereste von Hsp70 um-

faßt, bindet immer noch an die Domäne TRP2A mit einer Affinität von 12 μ M (Figur 1C).

Daraus ist zu schließen, daß die Bindung von TPR1 an C70 vollständig durch die Interaktion von TPR1 mit einem C-terminalen Dodekamer von Hsp70 beschrieben werden kann, während die Interaktion von TPR2A mit C90 im wesentlichen durch die fünf C-terminalen Aminosäuren von Hsp90, also ein Pentapeptid, vermittelt wird. Die gemessenen Affinitäten sind im übrigen vergleichbar mit jenen, die für die Interaktion von SH3-Domänen mit ihren Peptidliganden bestimmt wurden (Kuriyan und Cowburn, 1997, Annual Rev. Biophys. Biomol. Struct. 26, 259-288).

3. Raumformen der Komplexe aus TPR-Domäne und den Peptidliganden

Die beiden TPR-Domänen TPR1 und TPR2A von Hop wurden als Komplex mit ihrem jeweiligen Peptidliganden kristallisiert und deren hochaufgelöste Kristallstrukturen aufgeklärt. Ergebnis der Untersuchungen war eine als Kristallform vorliegende Raumform der beiden ggf. komplexierten Domänen. Beide TPR-Domänen bilden Mäander-förmige Strukturen aus sieben α -Helices (Figuren 2A und 2E), die in einer gegenläufigen Abfolge ("head to tail") ähnlich der Struktur der peptidfreien TPR-Domäne von PP5 (Das et al., 1998, EMBO J. 17, 1192-1199) angeordnet sind. Im Unterschied zur Sequenz von TPR1 weisen die TPR-Domänen PP5 und TPR2A eine Insertion zwischen "repeat" 2 und 3 auf, was zu einer Verlängerung der Helices 2B und 3A um jeweils einen "Turn" führt (Fig. 2E, Fig. 3). In beiden Strukturen erweist sich die Helix C, die C-terminal zu den drei TPR-Konsensusblöcken angeordnet ist, als integraler Bestandteil der TPR-Domäne (Figuren 2A, 2B, 2E und 2F).

Die TPR-Mäander bilden jetzt wiegenförmige ("cradle") Furchen, die die Peptide in einer ausgestreckten Konformation ("extended") aufnehmen (Figuren 2B, 2F, 2D und 2H). Die gebundenen Peptide stehen nur mit den Seitenketten der A-

Helices der TPR-Domänen in Kontakt, die die innere Oberfläche der Wiege ergeben (Figuren 2B und 2F). Durch eine "simulated annealing" (2Fo-Fc)-Elektronendichtekarte des TPR1-gebundenen Peptids, die, ohne das Peptid einzuschließen, berechnet wurde, zeigt sich, daß die letzten sieben Peptid-Aminosäurereste in dem Komplex mit der Domäne TPR1 sehr exakt definiert sind (Figur 2C). Eine ähnliche Elektronendichtekarte, die für das Peptid, das an die TPR2A-Struktur gebunden worden ist, berechnet wurde, zeigt, daß alle fünf Reste des gebundenen Peptids gut strukturiert sind (Fig. 2G). Die ausgestreckte Konformation der Peptide stellt sicher, daß eine größtmögliche Oberfläche gegenüber den TPR-Domänen als Kontaktbereich zur Verfügung steht und daß derart die spezifische Erkennung von kurzen Aminosäurerestücken mit ausreichender Affinität ermöglicht wird.

In der nachfolgenden Beschreibung der TPR-Peptid-Komplexe wird der C-terminale Asp-Rest der Peptide als Asp0 bezeichnet. Die vorhergehenden Reste werden in absteigender Reihenfolge mit Val-1, Glu-2, Glu-3, Ile-4, Thr-5, Pro-6 und Gly-7 für das Hsp70-Peptid (Figur 4A) bzw. als Met -4 für das Hsp90-Peptid (Figur 4B) numeriert. Nur die letzten acht Reste im Hsp70-Dodekamer-Peptid sind im TPR1-Komplex so geordnet, daß sie in der abschließenden Elektronendichtekarte erkennbar sind. Die Peptid-Seitenketten Pro-6, Ile-4, Val-1 und Asp0 sind an Wechselwirkungen mit der TPR1-Domäne beteiligt. Die übrigen Seitenketten im Peptidabschnitt mit geordneter Struktur, insbesondere die beiden nahezu absolut konservierten Glutaminsäure-Seitenketten an der Position -2 und -3, sind gegenüber dem Lösungsmittel exponiert (Fig. 2C; Fig. 4A). Im TPR2A-Komplex sind alle fünf Peptidreste in der abschließenden Elektronendichtekarte deutlich erkennbar. Mit Ausnahme von Glu-2 sind alle Seitenketten des Hsp90-Peptids an Wechselwirkungen mit der Domäne TPR2A beteiligt (Figur 4B). Alle elektrostatischen Kontakte zwischen den TPR-Domänen und den Peptiden sind ausschließlich für die Abschnitte des EEVD-Motivs zu verzeichnen, während die Abschnitte der gebundenen Peptide, die N-terminal zum

EEVD-Motiv liegen, ausschließlich hydrophobe und van-der-Waals-Wechselwirkungen eingehen (Figuren 4A und 4B).

Drei Arten von Wasserstoffbrückenbindungswechselwirkungen sind an der Ausbildung der Peptidbindung an die Domänen TPR1 und TPR2A beteiligt: (a) sequenzunabhängige Interaktion mit dem Peptidrückgrat, (b) sequenzspezifische Interaktionen mit den Peptid-Seitenketten und (c) Kontakte mit dem C-terminalen Hauptketten-Carboxylat des letzten Peptidrestes Asp0 (Figuren 4A und 4B). Wie weiter unten beschrieben ist, bilden die zuletzt erwähnten Kontakte und die elektrostatischen Wechselwirkungen mit dem Hauptketten-Carboxylat von Asp0 eine sog. Doppel-Carboxylat-Klammer ("two-carboxylate clamp"), die hochkonserviert zwischen den beiden Komplexen ist.

Eine Vielzahl der direkten Wasserstoffbrückenbindungswechselwirkungen von den TPR-Domänen zu den Hsp-Peptiden richtet sich auf das Peptidrückgrat, so daß keine sequenzspezifischen Merkmale für die Bindung genutzt werden. Im TPR1-Komplex (Figur 4A) ist die Seitenketten-Carbonylgruppe von Asn43 (von TPR1) an direkten Rückgrat-Wechselwirkungen beteiligt, die mit dem Rückgrat-Amid von Asp0 des Hsp70-Peptids und der Amin-Seitenkette von Lys73 ausgebildet werden. Die Amin-Seitenkette von Lys73 bildet wiederum eine Wasserstoffbrückenbindung mit der Hauptketten-Carbonylgruppe des Peptidrestes Glu-2 aus. Arg77 der TPR1-Domäne spielt eine Schlüsselrolle in der Bindung des Rückgrats des Peptids. Ihre Guanidiniumgruppe geht drei direkte Wasserstoffbrückenbindungen mit den Peptid-Carbonylgruppen ein, und zwar eine an der -2 und zwei an der -3 Position. Eine zusätzliche Wasserstoffbrückenbindung an die Carbonylgruppe von Glu-3 wird durch ein fest gebundenes Wassermolekül, das durch Lys 50 in TPR1 positioniert wird, vermittelt (Figur 4A).

Im TPR2A-Komplex tritt die Carbonyl-Seitenkette von Asn264 in Kontakt mit dem Rückgrat-Amid von Asp0 des Hsp90-Peptids, die Guanidiniumgruppe von Arg305 bildet eine Was-

serstoffbrücke mit der Hauptketten-Carbonylgruppe von Glu-2, die Hydroxylgruppe von Tyr236 eine Wasserstoffbrücke mit jener von Glu-3 und die Seitenkette von Glu271 tritt in Wechselwirkung mit der Amidgruppe von Glu-3. Zusätzlich ist
5 ein Kontakt zwischen der Hydroxylgruppe von Tyr236 mit der Hauptketten-Carbonylgruppe von Glu-3 zu beobachten.

Die einzige Peptid-Seitenkette im TPR1-Komplex, die durch eine elektrostatische Wechselwirkung erkannt wird, ist die
10 Seitenketten-Carboxylatgruppe von Asp0, die mit Lys73 interagiert (Figur 4A). Ein zusätzlicher Seitenkettenkontakt wird durch ein geordnetes Wassermolekül vermittelt, das tetrahedral durch die Seitenketten-Carbonylgruppen von Asp0 und Asn43, die Guanidiniumgruppe von Arg77 und das Seitenketten-Hydroxyl von Ser42 koordiniert wird. Die elektrostatischen Wechselwirkungen von TPR2A mit dem Hsp90-Peptid
15 sind jenen im TPR1-Komplex sehr ähnlich, mit Ausnahme einiger weniger Unterschiede.

TPR2A geht zwei Wasserstoffbrückenbindungen mit der Seitenkette von Asp0 via Lys301 einerseits und der Seitenketten-Amidgruppe von Gln298 andererseits ein. Genauso wie im TPR1-Komplex ist ein tetrahedral koordiniertes Wassermolekül in Kontakt mit der Asp0-Seitenkette, positioniert durch
20 die Seitenketten-Carbonylgruppe von Asn264, die Guanidiniumgruppe von Arg355 und die Seitenketten-Amidgruppe von Asn233 (Figur 3C und Figur 4). Im Unterschied zum TPR1-Komplex ist im TPR2A-Komplex die Seitenkette von Glu-3 an einem festen Netzwerk aus Wasserstoffbrückenbindungen mit
25 der TPR-Domäne beteiligt. Sie ist an direkten Kontakten zur Guanidiniumgruppe von Arg305 und der Seitenketten-Amidgruppe von Asn308 beteiligt, wobei sie zusätzlich in ein Netzwerk von indirekten Interaktionen, wobei geordnete Wassermoleküle involviert sind (Figur 4B), integriert ist.

35

In beiden TPR-Komplexen wird das Hauptketten-Carboxylat von Asp0 in seiner Position durch drei zusätzliche starke Wasserstoffbrückenbindungen mit den Seitenketten-Aminen von Lys8 (Lys229), Asn12 (Asn233) und Asn43 (Asn264) der TPR1-

bzw. TPR2A-Domäne fixiert. Über die zuvor beschriebenen elektrostatischen Interaktionen zwischen den TPR-Domänen und dem EEVD-Motiv der gebundenen Peptide hinaus ist der Peptidrest Val-1 an hydrophoben und van-der-Waals-Kontakten
5 beteiligt, die ebenfalls im wesentlichen bei den beiden Komplexen konserviert sind (Figuren 4A und 4B).

Wie bereits beschrieben, bilden die fünf Aminosäurereste von TPR1, die an elektrostatischen Wechselwirkungen mit dem
10 EEVD-Motiv beteiligt sind (Lys8, Asn12, Asn43, Lys73 und Arg77) eine Doppel-Carboxylat-Klammer ("two carboxylate clamp"), die fest mit dem endständigen Asp-Rest des gebundenen Peptids interagiert. Diese Reste zeigen deutliche strukturelle Gemeinsamkeiten mit den äquivalenten Resten
15 von TPR2A (Lys229, Asn233, Asn264, Lys301 und Arg305), sobald ihre C α -Atome übereinandergelagert werden (Figur 5). Die mittleren Standardabweichungen (rmsd) für die fünf Positionen der Doppel-Carboxylat-Klammer betragen 0,75 Å (verglichen mit 1,75 Å für die gesamten Domänen). Außer
20 Lys73 (Lys301) sind alle Seitenketten tatsächlich an der gleichen Position in den beiden Strukturen. Dieses "alignment" führt auch zu einer Überlagerung der beiden gebundenen Peptide. Dabei ist erkennbar, daß die Positionen Asp0 und Val-1 erstaunlich gut übereinander angeordnet
25 sind, während die N-terminalen Abschnitte der beiden Peptide zunehmend vom C- zum N-Terminus divergieren, wobei jeweils von verschiedenen Bereichen beim Eingehen von Wechselwirkungen mit der jeweiligen TPR-Domäne Gebrauch gemacht wird. Es ist zu bemerken, daß die Seitenkettenreste der Domänen TPR1 und TPR2A, die die Doppel-Carboxylat-Klammer
30 bilden, bei allen TPR-Domänen, von denen bekannt sind, daß sie die C-terminalen Domänen von Hsp70/Hsc70 oder Hsp90 binden (Figur 3), hochkonserviert sind. Dies führt zu der Vermutung, daß diese TPR-Domänen an das C-terminale Carboxylat von Hsp70 oder Hsp90 durch ein sehr ähnliches Netzwerk von elektrostatischen Interaktionen binden (Figur 4).
35

Eine Protein-Datenbanksuche läßt erkennen, daß sieben zusätzliche TPR-Proteine, die ein C-terminales Aspartat via

der Doppel-Carboxylat-Klammer zu binden in der Lage sein sollten, existieren, einschließlich mehrerer humaner Proteine, die an Krankheitsereignissen beteiligt sind (Figur 3). Insbesondere zu erwähnen sind die Proteine TTC1, TTC2, TTC3, TTC4, IRSP, SGT und KIAA0719, so daß erfindungsgemäß die Funktionalität dieser vorgenannten Proteine als TPR-Proteine mit Co-Chaperon-Funktion für Hsp70 oder Hsp90 offenbart werden. Insbesondere werden daher erfindungsgemäß Verwendungen der vorgenannten und in Figur 3 aufgezählten Proteine als Co-Chaperone von Hsp70 und/oder Hsp90 offenbart.

Die Aminosäurereste, die stromaufwärts vom EEVD-Motiv gelegen sind, gewährleisten durch hydrophobe Interaktion die Hsp70-Spezifität. Nach Maßgabe der erfindungsgemäßen Erkenntnisse sind die elektrostatischen Interaktionen der Domänen TPR1 und TPR2A mit dem EEVD-Motiv, wie oben beschrieben, nicht geeignet, zwischen den C-Termini von Hsp90 und Hsp70 eine Unterscheidung zu machen. Aus den Ergebnissen der Strukturaufklärung und den erfindungsgemäßen Raumformen der TPR/Peptid-Komplexe ist erkennbar, daß zusätzliche Kontakte mit den Peptidresten, die N-terminal zum EEVD-Motiv liegen, bestehen (Figuren 4A und 4B). Diese Wechselwirkungen sind entscheidend für die Peptidbindung, die mit einer physiologisch relevanten, hohen Affinität stattfinden muß (Figur 6A). Während das C-terminale Heptamerpeptid von Hsc70 an die TPR1-Domäne mit der gleichen Affinität wie die vollständige C-terminale Domäne von Hsp70/Hsc70 bindet, führt die Abspaltung der Aminosäurereste, die N-terminal zum EEVD-Motiv liegen, zu einem deutlichen Abfall der Affinität von 15-20 μM zu ungefähr 300 μM . Außerdem bindet das Peptid IEEVD, das bezüglich seiner Länge dem Hsp90-Peptid gleichkommt, mit einer Affinität von 140 μM signifikant schwächer als das Heptamer-Peptid (Figur 6A).

Der verborgene Oberflächenbereich für das strukturierte Okta-merpeptid im TPR1-Komplex beträgt 1330 \AA^2 , aber nur 650 \AA^2 für die vier Reste des IEEVD-Motivs. Die maßgeblichen Wech-

selwirkungen, die für die 20-fache Erhöhung der Affinität verantwortlich sind, beruhen demnach ausschließlich auf hydrophoben oder van-der-Waals-Interaktion von TPR1 mit den Seitenketten von Ile-4 und Pro-6 des Hsp70-Peptids (Fig. 4A). Jeder hydrophobe Kontakt des Peptids mit TPR1 ist im wesentlichen beschränkt auf eine spezifische A-Helix.

Pro-6 ist in einer hydrophoben Tasche, die durch Glu83 und Phe84 der Helix A3 gebildet wird, angeordnet. Ile-4 bindet in eine Tasche, die durch die Aminosäurereste Ala46, Ala49 und Lys50 der Helix A2 (Fig. 4A) gebildet wird. Der hydrophobe Rest im EEVD-Motiv, nämlich Val-1, tritt in hydrophobe Wechselwirkungen mit Asn12 und Leu15 in der Helix A1 und mit Asn43 in der Helix A2 (Fig. 4A).

Das im TPR2A-Komplex gebundene Peptid ist deutlich kürzer als jenes, das im TPR1-Komplex gebunden ist. Der insgesamt verborgene Oberflächenbereich im TPR2A/MEEVD-Komplex beträgt 930\AA^2 und 750\AA^2 für die Reste EEVD. Nichtsdestotrotz liegen die für das Hsp90-Pentapeptid MEEVD gemessenen Affinitäten gegenüber TPR2A in der gleichen Größenordnung wie die Affinitäten des Hsp70-Peptids GPTIEEVD für TPR1, wobei längere Peptide wiederum nicht mit einer höheren Affinität binden (Fig. 6B). Die beiden zusätzlichen Wasserstoffbrückenbindungen, die durch TPR2A zum Glu-3 des Peptids eingegangen werden, scheinen die geringere hydrophobe Wechselwirkungsfläche auszugleichen.

(Fig. 4B). Auch ist als Folge der stärkeren Wechselwirkung zwischen TPR2A und dem EEVD-Motiv festzustellen, daß der verborgene Oberflächenbereich in diesem Fall ungefähr 100\AA^2 größer ist als vergleichsweise für den verborgenen Oberflächenbereich, wie er sich für den Fall der Wechselwirkung von TPR1 in einem Komplex mit der Sequenz EEVD (ohne weitere N-terminale Aminosäuren) berechnet. Met-4 des Hsp90-Peptids ist an starken hydrophoben Interaktionen mit einer Tasche, die im wesentlichen durch die Seitenketten von Tyr236 und Glu271 gebildet wird, beteiligt. Val-1 des EEVD-Abschnitts bindet an eine hydrophobe Tasche, die durch Asn233, Asn264 und Ala267 gebildet wird.

Infolge mit den stärkeren Interaktionen in dem Hsp90-EEVD-Abschnitt führt eine Verkürzung des Pentapeptids MEEVD zu EEVD zwar zu einem signifikanten, aber gleich-
5 wohl mäßigen Bindungsaffinitätsverlust (von $11\mu\text{M}$ zu $90\mu\text{M}$), während die Domäne TPR1 das EEVD-Peptid nur mit einer Affinität von $300\mu\text{M}$ bindet (Fig. 6A und Fig. 6B).

Die Abschnitte, die N-terminal zum EEVD-Motiv liegen, unterscheiden sich bei den C-Termini von Hsp70/Hsc70 und
10 Hsp90-Proteinen in auffälliger Weise (Fig. 7A und B), was vermuten läßt, daß diese Sequenzen nicht nur für das Bindungsverhalten mit hoher Affinität wichtig sind, sondern auch für die TPR-Spezifität verantwortlich sind. Die acht
15 C-terminalen Aminosäuren sind nahezu vollständig in allen cytosolischen Varianten von eukaryontischen Hsp70 und Hsc70-Proteinen (Konsensus: GPTIEEVD) konserviert. Außerdem handelt es sich bei diesen Aminosäureresten auch um jene, die in der Kristallstruktur des TPR1-Peptid-
20 Komplexes strukturell gut definiert sind. Diese Sequenz ist mit großer Wahrscheinlichkeit Lösungsmittel-exponiert, da sie mit der Peptidbindungsdomäne von Hsp70/Hsc70 über einen flexiblen "Linker"-Bereich von ungefähr neun Aminosäuren, bestehend aus einer Folge von
25 Ala, Ser und Gly-Resten (Fig. 7A), verbunden ist. Der Sequenzvergleich ("Alignment") der C-Termini von cytosolischen Varianten von eukaryontischen Hsp90 läßt vermuten, daß hier eine ähnliche Wechselwirkung von Hsp90-Proteinen mit ihren jeweiligen TPR-Bindungspartnern vorliegt (Fig.
30 7B). In Übereinstimmung mit den thermodynamischen Ergebnissen ergibt sich, daß ein hohes Maß an sequenzieller Konservierung für die letzten fünf Aminosäuren (Konsensussequenz: MEEVD) in Hinblick auf die TPR-Bindung wichtig ist.

35

Ein struktureller Vergleich (Fig. 5) erklärt auch, auf welche Weise die spezifische Bindung von Hsp70 und Hsp90 an die TPR-Domäne von Hop-Protein erzielt wird. Während die letzten beiden Aminosäurereste der Hsp70 und Hsp90-

Peptide an vergleichbaren bzw. äquivalenten Stellen in ihren jeweiligen TPR-Domänen gebunden sind, ist für die weitere N-terminal gelegenen Abschnitte der Peptide eine Bindung an stark verschiedene TPR-Bereiche zu beobachten. Während der gänzlich konservierte VD-Teil der beiden Peptide in jeder der beiden TPR-Domänen durch elektrostatische Wechselwirkungen über die konservierte Doppel-Carboxylat-Klammer ("two-carboxylate clamp") angeordnet ist, verwenden die divergenten N-terminalen Bereiche der Peptide unterschiedliche hydrophobe Höhlen bzw. Aussparungen in den TPR-Domänen für die Selektivität der Bindung. Nur schwache, nicht spezifische Bindung an TPR1 wurde für die C-terminale Domäne von Hsp90 (C90) und für von C90 abstammende Peptide beobachtet, wobei die Affinitäten in der gleichen Größenordnung liegen, wie sie für ein Peptid mit der vollständig konservierten EEVD-Sequenz allein beobachtet wurden (Fig. 6A). Zu ähnlichen Ergebnissen führt die Wechselwirkung der Domäne TPR2A mit C70 oder von C70 stammenden Peptiden aus der C-terminalen Bindungsdomäne von Hsp70 (Fig. 6B). In diesem Fall binden kurze C70-Peptide an die Domäne TPR2A mit einer Affinität, die auch für das Tetrapeptid EEVD beobachtet wurde, während die C70-Domäne mit einer signifikant reduzierten Affinität (250 μ M) bindet. Dies ist darauf zurückzuführen, daß sterische Probleme zwischen der C70-Domäne und TPR2A bestehen.

Tabelle 1 Statistische Angaben zur Datensammlung und der Verfeinerung für den TPR1-Komplex

Datensammlung

Röntgenquelle	NSLS, X12B ^b $\lambda = 0.949 \text{ \AA}$, T = 100 K
Raumgruppe	P4 ₁
Zellparameter	a = 75.47 Å, c = 42.89 Å
Zahl der Moleküle/asymmetr.Einheit	2
Zahl der Reflexe/Individualreflexe	146181 / 30804
Auflösung (Å)	20.0 - 1.60 (1.66-1.60)
Vollständigkeit des Datensatzes (%) ^z	95.8 (75.2)
$\langle I \rangle / \langle \sigma_I \rangle$	32.5 (3.3)
R _{sym} (%)	4.1 (30.5)

Model Refinement^d

Auflösung (Å)	20.0 - 1.60
Zahl der verwendeten Reflexe	30804
Zahl der Reflexe in R _{free} Satz	3100
R _{work} (%) ^e	18.2 ^f
R _{free} (%) ^e	21.6 ^f
Zahl der Protein-/Ligandenatome	1840 / 120
Zahl der Heteroatome	36
Zahl der Lösungsmittelmoleküle	245
R.m.s.d. Bindungslänge (Å)	0.008
R.m.s.d. Bindungswinkel (°)	1.3

^aValues as defined in SCALEPACK (Otwinowski and Minor, 1997)^bNational Synchrotron Light Source in Brookhaven, beamline X12B^cDrop in higher resolution shell due to rectangular detector shape^dValues as defined in SHELXL (Sheldrick 1997) for peptide free / CNS (Brünger et al., 1998) for complex^eNo sigma cutoff^fNo NCS restraints

Tabelle 2 Statistische Angaben zur Datensammlung und der Verfeinerung für den TPR2A-Komplex

Datensammlung

Raumgruppe	C2				
Einheitszelle	a = 73.28 Å, b = 48.27 Å, c = 38.06 Å, $\beta = 91.30^\circ$				
	Native ^a	Ni1 ^b	Ni2 ^b	Se1 ^b	Se2 ^b
Röntgenquelle	ESRF, ID14-3 ^c	DESY, BW6 ^d			
Auflösung (Å)	15-1.9 (1.95-1.90)	17-2.1 (2.14-2.10)			
Wellenlänge (Å)	$\lambda = 0.9402$	$\lambda = 1.4828$	$\lambda = 1.4840$	$\lambda = 0.9793$	$\lambda = 0.9798$
I / σ_I	22.8 (9.0)	22.3 (10.2)	22.8 (10.1)	23.8 (11.1)	25.6 (10.6)
Vollständigkeit des Datensatzes (%)	97.1 (91.7)	93.0 (94.9)	98.8 (98.6)	96.8 (96.8)	88.0 (90.1)
R _{merge} (%) ^e	3.8 (6.8)	2.8 (8.3)	3.3 (10.5)	3.3 (8.8)	3.1 (9.0)

MAD Phasing^f

Anomalous scatterer	1 Ni, 2 Se			
Auflösung (Å)	17.0 - 2.1			
Figure of merit	0.74			
R _{culis_ano}	0.64	0.87	0.65	0.85
Phasing power centric	0.48	-	1.51	1.30
Phasing power acentric	0.65	-	2.46	2.27

Model Refinement^g

Auflösung (Å)	10-1.9	Zahl der Protein-/Ligandenatome	1042 / 44
Zahl der Reflexe für R _{work}	9217	Zahl der Heteroatome (Ni)	1
Zahl der Reflexe für R _{free}	1003	Zahl der Lösungsmittelmoleküle	152
R _{work} (%) ^h	18.1	R.m.s.d. Bindungslänge (Å)	0.008
R _{free} (%) ^h	21.9	R.m.s.d. Bindungswinkel (°)	1.2

^aValues as defined in XDS (Kabsch, 1993), ^bValues as defined in SCALEPACK (Otwinowski and Minor, 1997),

^cEuropean Synchrotron Radiation Facility in Grenoble, beamline ID14-3, ^dDeutsches Elektronen Synchrotron in Hamburg, beamline BW6, ^eBijvoet pairs separated except for the native data set, ^fUnweighted values as defined in MLPHARE (CCP4, 1994), ^gValues as defined in CNS (Brünger et al., 1998), ^hNo sigma cutoff

Patentansprüche

5

1. Raumform eines Polypeptids, dadurch gekennzeichnet,
daß das Polypeptid in der Raumform mindestens eine
Aminosäuresequenz eines TPR-Strukturmotivs eines
Hop-Proteins oder ein Derivat einer solchen Ami-
nosäuresequenz enthält.
2. Raumform eines Polypeptids nach Anspruch 1, dadurch
gekennzeichnet, daß das Polypeptid in der Raumform
mindestens eine der in Figur 3A wiedergegebenen Ami-
nosäuresequenzen (1), (2), (3), (4), (5), (6), (7),
(8) und/oder (9) enthält.
3. Raumform eines Polypeptids nach Anspruch 1 oder 2,
dadurch gekennzeichnet, daß das Polypeptid in der
Raumform mindestens eine der Aminosäuresequenzen der
Domäne TPR1, TPR2A oder TPR2B eines Hop-Proteins,
eines Abschnitts/e derselben oder Derivats/e dersel-
ben enthält.
4. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenann-
ten Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, daß
das Polypeptid in der Raumform mindestens eine der
Aminosäuresequenzen (1), (2) oder (3), wie in Figur
3B wiedergegeben, enthält.
5. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenann-
ten Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, daß
die in dem Polypeptid enthaltene mindestens eine
Aminosäuresequenz eines TPR-Strukturmotivs oder ei-
ner TPR-Domäne einer Aminosäuresequenz(en) eines
Hop-Proteins eukaryotischen Ursprungs entspricht.

6. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 1 bis 5, dadurch gekennzeichnet, daß die in dem Polypeptid enthaltene Aminosäuresequenz eines TPR-Strukturmotivs oder einer TPR-Domäne einer Aminosäuresequenz(en) eines Hop-Proteins humanen Ursprungs entspricht.
5
7. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 1 bis 6, dadurch gekennzeichnet, daß das Polypeptid die Aminosäuresequenz eines eukaryotischen Hop-Proteins aufweist.
10
8. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 1 bis 7, dadurch gekennzeichnet, daß die Raumform das Polypeptid und mindestens eine weitere Verbindung aufweist.
15
9. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 1 bis 8, dadurch gekennzeichnet, daß die Raumform das Polypeptid und mindestens eine Verbindung aufweist, die als Ligand an das Polypeptid bindet.
20
10. Raumform eines Polypeptids nach Anspruch 8 oder 9, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung oder der Ligand ein nicht physiologisch auftretendes Molekül ist.
25
11. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 1 bis 10, dadurch gekennzeichnet, daß die Raumform ein Polypeptid und mindestens einen physiologischen Liganden oder mindestens einen Abschnitt eines physiologischen Liganden für das Polypeptid aufweist.
30
12. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 1 bis 11, dadurch gekennzeichnet, daß die Raumform ein Polypeptid und mindestens einen Liganden oder einen Abschnitt eines Liganden für das
35

Polypeptid aufweist, wobei der Ligand an die Aminosäuresequenz eines TPR-Strukturmotivs, insbesondere an die Aminosäuresequenz einer TPR-Domäne, bindet.

5

13. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 8 bis 12, dadurch gekennzeichnet, daß der Ligand ein Polypeptid, Oligopeptid, Dipeptid oder ein synthetisch modifiziertes Derivat eines Poly-, Oligo- oder Dipeptids ist.

10

14. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 8 bis 13, dadurch gekennzeichnet, daß der Ligand eine Aminosäuresequenz oder einen Abschnitt einer Aminosäuresequenz eines Proteins aus der Klasse der Chaperon-Proteine oder ein Derivat eines/r solchen Aminosäuresequenz oder eines solchen Abschnitts enthält.

15

15. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 8 bis 14, dadurch gekennzeichnet, daß der Ligand einen Abschnitt der C-terminalen Aminosäuresequenz eines Chaperon-Proteins aufweist.

20

16. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 8 bis 15, dadurch gekennzeichnet, daß der Ligand eine Aminosäuresequenz oder einen Abschnitt einer Aminosäuresequenz des Chaperon-Proteins Hsp70 und/oder Hsp90 aufweist.

25

17. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 8 bis 16, dadurch gekennzeichnet, daß der Ligand ein Inhibitor der physiologischen Funktion, insbesondere der Adapterfunktion, eines Hop-Proteins ist.

30

18. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 8 bis 17, dadurch gekennzeichnet, daß der Ligand ein Inhibitor der Interaktionen zwischen

35

den Proteinen Hop und Hsp70 und/oder den Proteinen Hop und Hsp90 ist.

- 5 19. Raumform eines Polypeptids nach einem der vorgenannten Ansprüche 1 bis 18, dadurch gekennzeichnet, daß die Raumform des Polypeptids und ggf. mindestens einer weiteren Verbindung eine Kristallform ist.
- 10 20. Raumform eines Polypeptids als Kristallform nach Anspruch 19, dadurch gekennzeichnet, daß die Kristallform Metall-Ionen, insbesondere Schwermetall-Ionen, enthält.
- 15 21. Raumform eines Polypeptids als Kristallform nach Anspruch 19 oder 20, dadurch gekennzeichnet, daß die Kristallform des Polypeptids mindestens ein TPR-Strukturmotiv eines Hop-Proteins (Struktur der Sequenzen (1), (2), (4), (5), (7), und/oder (8) gemäß Figur 3A) mit Strukturkoordinaten der entsprechenden Sequenzen, wie in Figur 3C und 3D bzw. Fig. 3E (für die Sequenzen (2), (5) und (8)) wiedergegeben, enthält.
- 20 22. Raumform eines Polypeptids als Kristallform nach einem der Ansprüche 19 bis 21, dadurch gekennzeichnet, daß die Kristallform des Polypeptids mindestens eine TPR-Domäne eines Hop-Proteins (Struktur der Sequenzen (1) und (2) gemäß Figur 3B) mit den entsprechenden Strukturkoordinaten, wie in Figur 3C und Figur 30 3D für TPR1 und Figur 3E für TPR2A wiedergegeben, enthält.
- 35 23. Kristall, enthaltend pro asymmetrischer Einheit in der Einheitszelle des Kristalls mindestens ein Polypeptid und ggf. mindestens eine weitere Verbindung, dadurch gekennzeichnet, daß die Polypeptide im Kristall eine Raumform nach einem der Ansprüche 19 bis 22 einnehmen.

24. Kristall nach Anspruch 23, dadurch gekennzeichnet,
daß die Raumgruppe des die Kristallform aufweisenden
Kristalls monoklin, tetragonal, orthorhombisch, ku-
bisch, triklin, hexagonal oder trigonal/rhombo-
hedral ist.
25. Kristall nach Anspruch 23 oder 24, dadurch gekenn-
zeichnet, daß die Raumgruppe des eine Kristallform
nach einem der Ansprüche 19 bis 22 aufweisenden Kri-
stalls $P2_1$, $C2$ oder $P4_1$ ist.
26. Kristall nach einem der Ansprüche 23 bis 25, dadurch
gekennzeichnet, daß die Einheitszelle des die Kri-
stallform enthaltenden Kristalls Zellkonstanten von
ungefähr $a = 31,2 \text{ \AA}$, $b = 43,8 \text{ \AA}$, $c = 38,3 \text{ \AA}$ und $\beta =$
 $101,8^\circ$ oder $a = 75,5 \text{ \AA}$ und $c = 42,9 \text{ \AA}$ aufweist.
27. Verfahren zur Herstellung eines Kristalls mit Ein-
heitszellen, enthaltend in der asymmetrischen Ein-
heit mindestens eine Raumform eines Polypeptids und
ggf. mindestens einer weiteren Verbindung, nach ei-
nem der Ansprüche 24 bis 27, dadurch gekennzeichnet,
daß
- (a) das Polypeptid in einem Expressionssystem überex-
primiert wird,
 - (b) das überexprimierte Polypeptid gereinigt und auf-
konzentriert wird,
 - (c) das gemäß (b) erhaltene Polypeptidkonzentrat in
einem geeigneten Puffersystem, ggf. unter Hinzufügen
mindestens einer weiteren Verbindung, ge-
löst wird und
 - (d) die Kristallisierung, bspw. durch Dampfdiffusi-
onsverfahren, eingeleitet wird.
28. Verbindung mit der Eigenschaft, als Ligand an Struk-
turbereiche eines Hop-Proteins oder strukturell mit
einem Hop-Protein verwandter Proteine, insbesondere

PP5, FKBP51, FKBP52, Cyp40, TOM34, TOM70, CNS1-sc, TTC1, TTC2, TTC3, TTC4, IRSP, SGT oder KIAA0719, zu binden, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung nicht-kovalente Wechselwirkung mit der Hauptkette und/oder den Seitenketten von Aminosäuren, die Bestandteil einer TPR-Domäne eines Hop-Proteins oder eines strukturell mit einem Hop-Protein verwandten Proteins sind, eingeht.

29. Verbindung nach Anspruch 28, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung als Inhibitor der physiologischen Adapterfunktion eines Hop-Proteins für Chaperon-Proteine, insbesondere Hsp70 und/oder Hsp90, wirkt.
30. Verbindung nach Anspruch 28 oder 29, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung an eine gemäß einem der Ansprüche 1 bis 22 erhaltene Raumform so bindet, daß die physiologische Bindung von Chaperon-Proteinen, insbesondere Hsp70 oder Hsp90, an die TPR-Domäne(n) eines Hop-Proteins blockiert wird.
31. Verbindung nach einem der Ansprüche 28 bis 30, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung mit mindestens einer der Aminosäuren Lys8, Asn12, Asn43, Lys73 und Arg77 eines Hop-Proteins oder der an den gemäß Figur 3 entsprechenden Positionen befindlichen Aminosäuren aus TPR-Domänen von mit Hop-Protein verwandten Proteinen in Wechselwirkung tritt.
32. Verbindung nach einem der Ansprüche 28 bis 31, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung eine gegenüber einer TPR-Domäne eines Hop-Proteins mit den Strukturkoordinaten, wie in den Figuren 3C, 3D und 3E für TPR1 und TPR2A wiedergegeben, komplementäre strukturelle Ausgestaltung aufweist.
33. Verbindung nach einem der Ansprüche 28 bis 32, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung ein modifiziertes oder unmodifiziertes Di- oder Oligopeptid

oder ein Peptidomimetikum eines solchen Di- oder Oligopeptids ist.

- 5 34. Verbindung nach einem der Ansprüche 28 bis 33, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung ein Oligopeptid ist, das die natürliche C-terminale Aminosäuresequenz eines Chaperon-Proteins, insbesondere von Hsp70 oder Hsp90, enthält.
- 10 35. Verbindung nach einem der Ansprüche 28 bis 34, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung ein Oligopeptid ist, das die Aminosäuresequenz EEVD enthält.
- 15 36. Verbindung nach einem der Ansprüche 28 bis 35, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung ein Oligopeptid ist, das die Aminosäuresequenz GPXIEEVD oder SXMEEVD enthält, wobei X für eine beliebige, natürlich auftretende Aminosäure steht.
- 20 37. Verbindung nach einem der Ansprüche 34 bis 36, dadurch gekennzeichnet, daß die Verbindung die in den Ansprüchen 34 bis 36 genannten Aminosäuresequenzen am C-Terminus aufweist.
- 25 38. Polypeptid mit einer Raumform nach einem der Ansprüche 1 bis 22, dadurch gekennzeichnet, daß das Polypeptid an ein Chaperon-Protein, insbesondere Hsp70 oder Hsp90, bindet, wobei das Polypeptid in bezug auf
- 30 seine Adapterfunktion infunktionell ist.
- 35 39. Verwendung einer Verbindung oder eines Polypeptids nach einem der Ansprüche 28 bis 38 zur Herstellung eines Arzneimittels.
40. Verwendung einer Verbindung nach Anspruch 39 zur Herstellung eines Arzneimittels zur Behandlung von Tumorerkrankungen, zur Immunsuppression, insbesondere von Autoimmunerkrankungen oder anderen Entzün-

dungserkrankungen, GvHD oder zur Behandlung von Virusinfektionen.

41. Verfahren zur Identifizierung einer Verbindung mit
5 der Eigenschaft, als Inhibitor der Wechselwirkung
zwischen einem Hop-Protein und einem Chaperon-
Protein, insbesondere Hsp70 oder Hsp90, zu wirken,
dadurch gekennzeichnet, daß
- (a) eine Raumform nach einem der Ansprüche 1 bis 22
10 durch Strukturaufklärung erhalten wird,
- (b) die Struktur der Raumform mit Hilfe der Strukturko-
ordinaten dreidimensional dargestellt wird,
- (c) sterische Eigenschaften und/oder funktionelle Grup-
pen einer Verbindung so gewählt werden, daß Wechsel-
15 wirkungen zwischen der Verbindung und der Haupt-
und/oder den Seitenketten des Polypeptids in dem
Bindungsbereich ausgebildet oder ggf. optimiert wer-
den.
42. Verfahren nach Anspruch 41, dadurch gekennzeichnet,
20 daß in einem Verfahrensschritt (d) die dreidimensio-
nale Struktur der gemäß (c) erhaltenen Verbindung
ermittelt und in die Polypeptidstruktur modelliert
wird.
43. Verfahren nach Anspruch 41 oder 42, dadurch gekenn-
25 zeichnet, daß in einem Verfahrensschritt (e) die
Stärke der Wechselwirkung zwischen der Verbindung
und dem aufgefalteten Polypeptid gemäß einer Raum-
30 form nach einem der Ansprüche 1 bis 22 bestimmt
wird.
44. Verfahren nach einem der Ansprüche 41 bis 43, da-
35 durch gekennzeichnet, daß gemäß Verfahrensschritt
(b) alle oder ein Teil der Strukturkoordinaten aus
Figur 3D dreidimensional dargestellt werden.
45. Verfahren nach einem der Ansprüche 41 bis 44, da-
durch gekennzeichnet, daß die Verfahrensschritte

(c), (d) und (e) zyklisch so lange wiederholt werden, bis die gemäß (e) erhaltene Stärke der Wechselwirkung zwischen der Verbindung und der Polypeptidstruktur in einer Raumform mit einer Struktur gemäß einem der Ansprüche 1 bis 22 optimiert wird.

46. Verfahren nach einem der Ansprüche 41 bis 45, dadurch gekennzeichnet, daß in einem Verfahrensschritt (f) die Eigenschaften, insbesondere die inhibitorischen Eigenschaften, der modellierten Verbindung in einem biologischen Testsystem ermittelt werden.

47. Verfahren zur Identifizierung einer Verbindung, mit der Eigenschaft, als Inhibitor der Wechselwirkung zwischen einem Hop-Protein und mindestens einem Chaperon-Protein, insbesondere Hsp70 oder Hsp90, zu wirken, dadurch gekennzeichnet, daß

- (a) ein biologische Testsystem für derartige potentielle Inhibitor-Verbindungen etabliert wird,
- (b) als Inhibitoren wirkende Verbindungen durch ein biologisches Testsystem gemäß (a) ermittelt werden,
- (c) die Konformation der Verbindung bestimmt wird,
- (d) die Struktur eines Polypeptids aus einer Raumform, wie nach einem der Ansprüche 1 bis 22 gegeben, durch deren Strukturkoordinaten 3-dimensional graphisch dargestellt wird und
- (e) die gemäß (b) und (c) erhaltene Struktur der Verbindung in die gemäß (d) erhaltene Struktur des Polypeptids eingefügt wird.

48. Verfahren nach Anspruch 47, dadurch gekennzeichnet, daß in einem Verfahrensschritt (f) Art und/oder Stärke der Wechselwirkung zwischen der Verbindung und der Raumform eines Polypeptids bestimmt wird/werden.

49. Verbindung als Inhibitor der Wechselwirkung zwischen einem Hop-Protein und einem Chaperon-Protein, insbe-

sondere Hsp70 und/oder Hsp90, dadurch gekennzeichnet, daß sie aus einem Verfahren nach einem der Ansprüche 41 bis 48 erhalten wird.

- 5 50. Verfahren zur Darstellung einer 3-dimensionalen
Struktur eines Polypeptids unbekannter Struktur,
enthaltend mindestens eine Aminosäuresequenz eines
TPR-Strukturmotivs eines Hop-Proteins oder minde-
stens ein Derivat einer solchen Aminosäuresequenz,
10 oder eines Komplexes unbekannter Struktur, enthal-
tend ein derartiges Polypeptid, dadurch gekennzeich-
net, daß die unbekannte Struktur des Polypeptids
oder des Komplexes auf der Basis einer bekannten
Raumform nach einem der Ansprüche 1 bis 22 ermittelt
15 wird.
51. Verfahren nach Anspruch 50, dadurch gekennzeichnet,
daß zur Aufklärung der unbekannten Struktur Struk-
turkoordinaten einer Raumform nach einem der Ansprü-
20 che 1 bis 22, insbesondere Strukturkoordinaten wie
in Figur 3C oder 3D dargestellt, eingesetzt werden.
52. Verfahren nach Anspruch 50 oder 51, dadurch gekenn-
zeichnet, daß
- 25 (a) die Primärsequenz eines Polypeptids unbekannter 3D-
Struktur mit der Primärsequenz eines Polypeptids
bekannter Struktur verglichen wird,
- 30 (b) für gemäß (a) erhaltene homologe Abschnitte die 3D-
Struktur des Polypeptids unbekannter Struktur in
Anlehnung an die Struktur aus einer Raumform nach
einem der Ansprüche 1 bis 22 modelliert wird, und
- 35 (c) mit Hilfe entsprechender Computer-Programme energe-
tische Optimierungen der gemäß (b) modellierten
Struktur oder Strukturbereiche durchgeführt werden.
53. Verfahren zur Identifizierung einer Verbindung, die
die Wechselwirkung zwischen einem Polypeptid, ent-
haltend mindestens eine Aminosäuresequenz eines TPR-
Strukturmotivs eines Hop-Proteins oder ein Derivat

einer solchen Aminosäuresequenz, insbesondere einem Hop-Protein, unbekannter 3D-Struktur und einem Chaperon-Protein, insbesondere Hsp70 und/oder Hsp90, inhibiert, dadurch gekennzeichnet, daß

- 5 (a) die unbekannte 3D-Struktur des Polypeptids nach einem Verfahren nach einem der Ansprüche 50 bis 52 ermittelt wird und
- (b) mit Hilfe eines Verfahrens nach einem der Ansprüche 41 bis 48 eine Verbindung, mit der Eigenschaft
- 10 als Inhibitor der Wechselwirkung eines Chaperon-Proteins mit einem Polypeptid unbekannter 3D-Struktur zu wirken, ermittelt wird.

15 54. Arzneimittel, enthaltend einen Inhibitor, erhältlich aus einem Verfahren nach einem der Ansprüche 41 bis 48 oder Anspruch 53.

20 55. Verwendung eines Inhibitors, erhältlich aus einem Verfahren nach einem der Ansprüche 41 bis 48 oder Anspruch 53 zur Herstellung eines Arzneimittels zur Behandlung von Tumorerkrankungen, zur Immunsuppression, insbesondere zur Behandlung von Autoimmunerkrankungen oder zur Behandlung von anderen Entzündungserkrankungen, GvHD oder zur Behandlung von Virusinfektionen.

25

30 56. DNA-Sequenz, dadurch gekennzeichnet, daß die DNA-Sequenz für eine Aminosäuresequenz codiert, die die (Teil)-Sequenz eines der Proteine TTC1, TTC2, TTC3, TTC4, IRSP, SGT oder KIAA0719, wie in Figur 3 beschrieben, enthält, wobei die vorgenannte (Teil)-Sequenz an Hsp70 und/oder Hsp90 bindet.

35 57. Aminosäuresequenz, dadurch gekennzeichnet, daß sie von einer DNA-Sequenz nach Anspruch 56 codiert wird.

58. Aminosäuresequenz nach Anspruch 57, dadurch gekennzeichnet, daß es sich um eine der in Figur 3 wiedergegebenen (Teil)-Aminosäuresequenzen der Proteine

TTC1, TTC2, TTC3, TTC4, IRSP, SGT oder KIAA0719 handelt.

59. Verwendung einer Aminosäuresequenz, eines Abschnitts
5 einer Aminosäuresequenz oder eines Derivats einer Aminosäuresequenz oder eines Abschnitts derselben nach Anspruch 58 zur Inhibition der physiologischen Funktion von Hsp70 und/oder Hsp90.
- 10 60. Arzneimittel, enthaltend eine Aminosäuresequenz, einen Abschnitt einer Aminosäuresequenz oder ein Derivat einer Aminosäuresequenz oder eines Abschnitts derselben nach Anspruch 58.

15

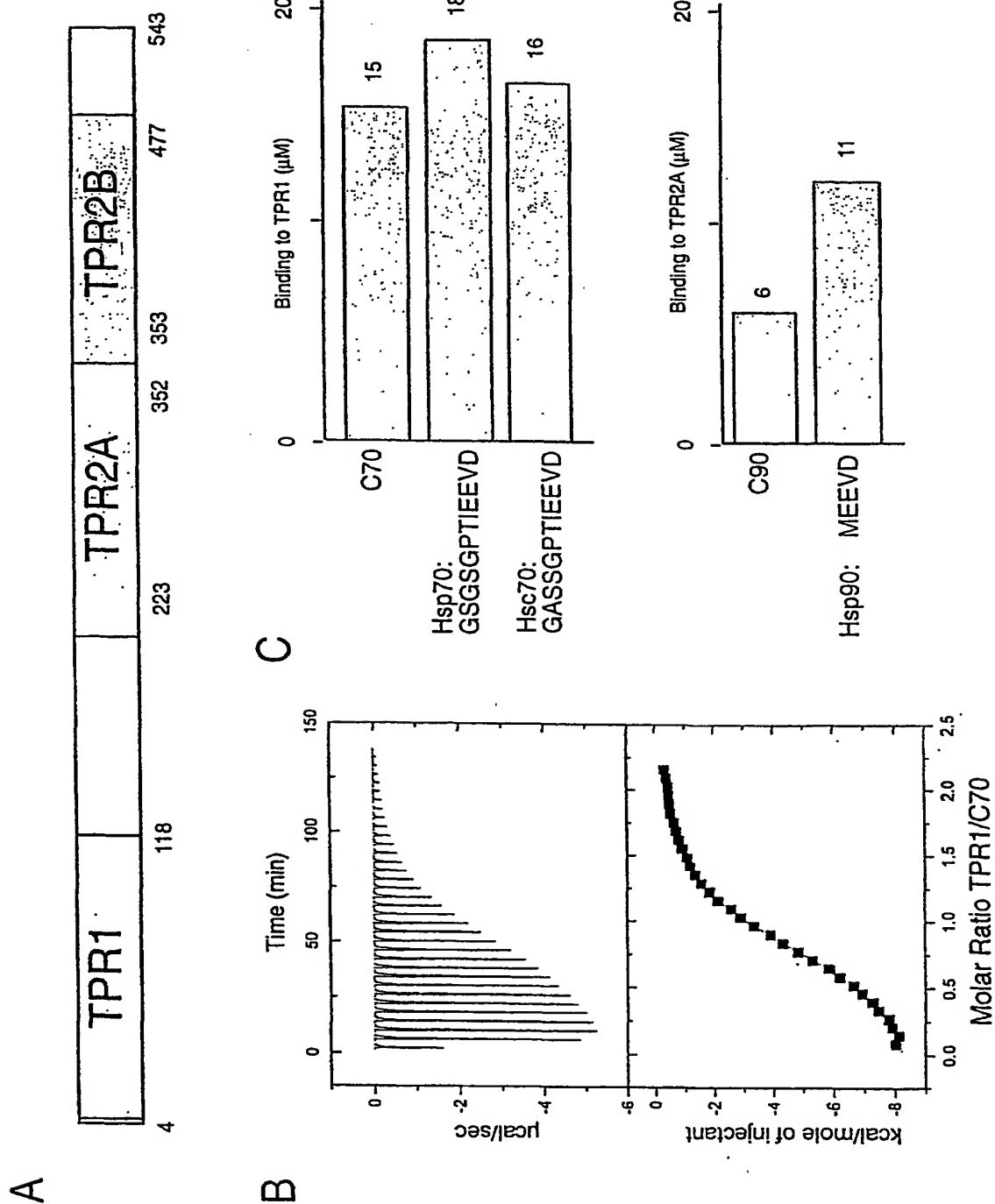
20

25

30

35

Fig.1



TPR1 complex

TPR2A complex

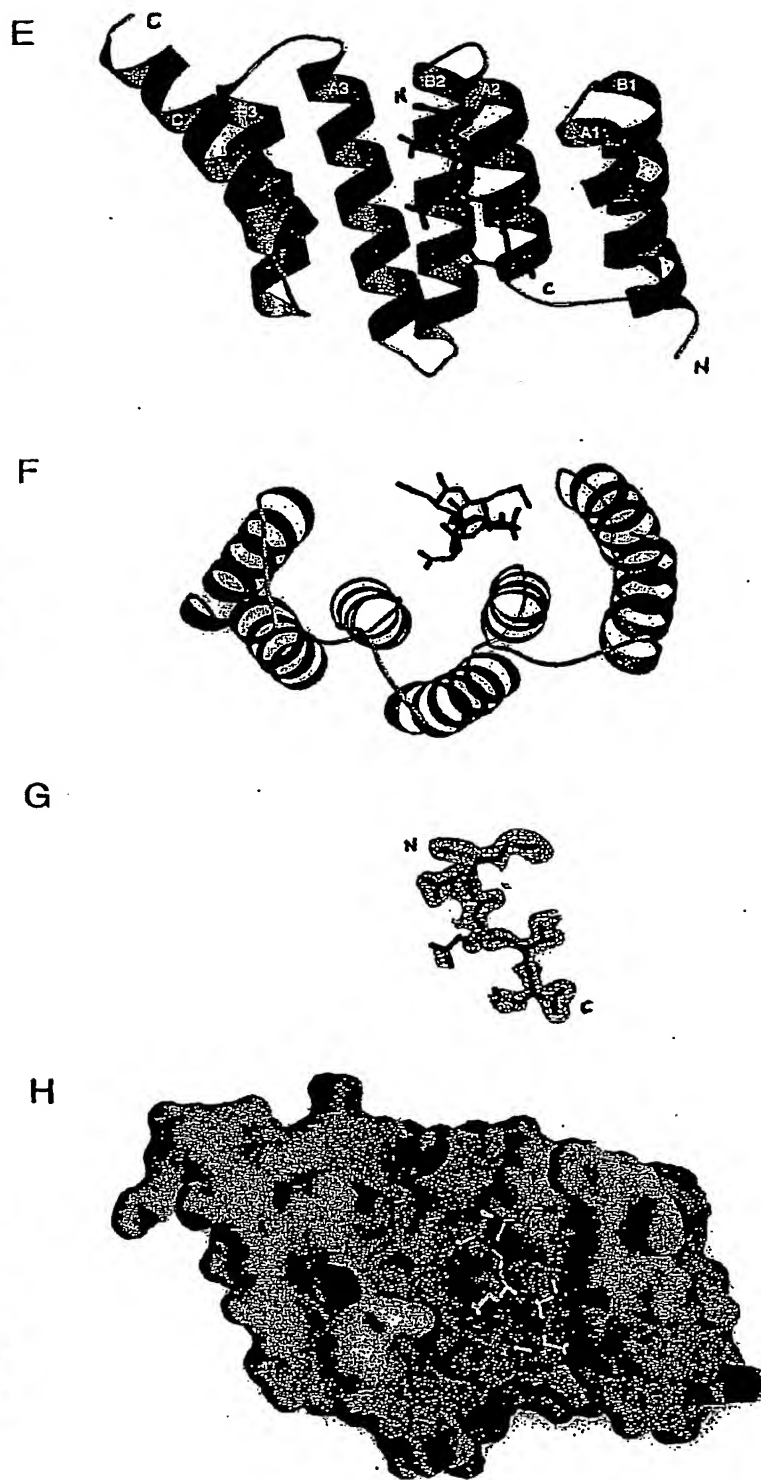
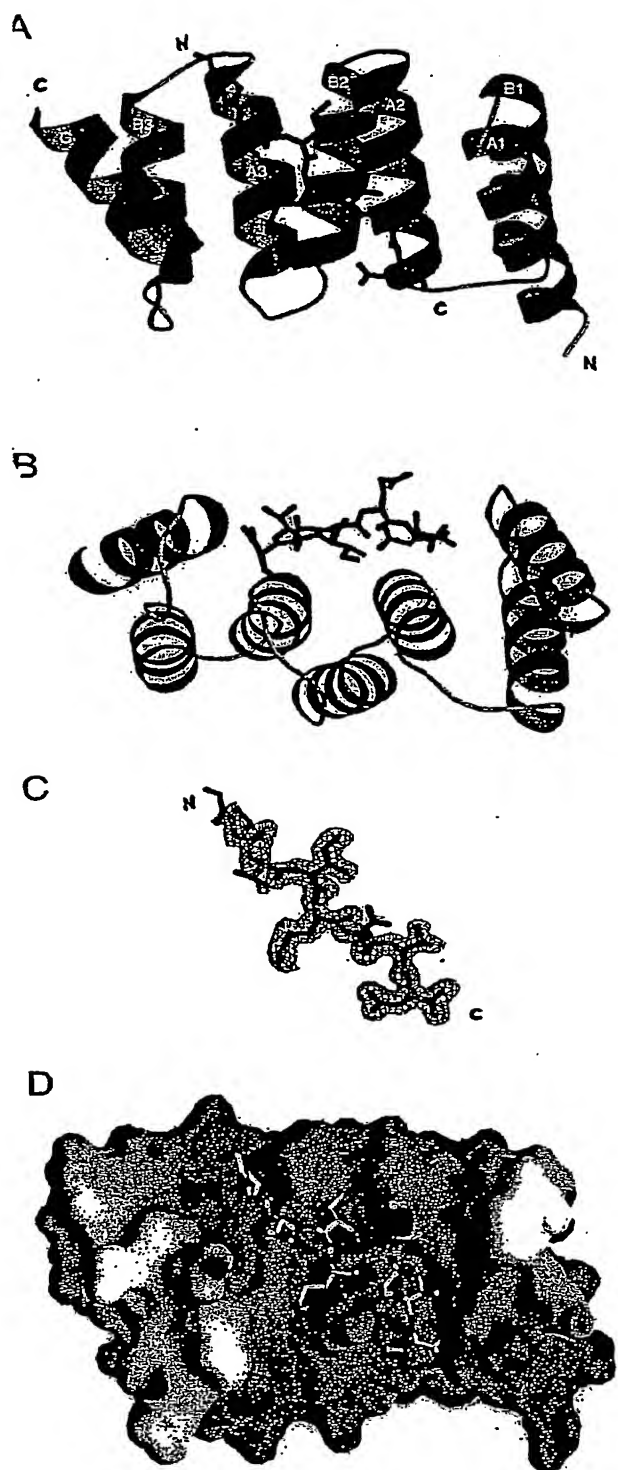


Fig. 2

Fig. 3

	HELIX 1A	HELIX 1B	HELIX 2A	HELIX 2B
TPR1	4	VNELKEGKNAKLSVGNIDDAIQCYSEAIKLDPHN		-----HVLVSNRSAAYAKKGYQKAYEDGCKTVDLKPDW
CHIP	26	AQELKEQGNRLFVGRKYPEAAACGRVITRNPLV		-----AVVYTNRALCYLRMQQHEQALDCRRALELDQOS
TPR2A	225	ALKEKELGNDNYKKKDFDTALKHNDKAKELDPTN		-----MTYITNQAAVYFEKGDYKCEKALEVEGRENREDYRQI
TPR2B	360	ALEEKNGNECFQKGDYPQAMKHTYTAIKRNPKO		-----AKLYSNRAACVTKLLEFQALKOCCEGTQLEPTF
PP5	28	AELAKTQANDYFKAQDYENAIKFYSQAIELNPSN		-----AIYYGNRSLAVLTRETCYGYALGDNTRAIELDCKY
FKBP51	268	AAIVKEKGVAFYKGGKYMQAVIQKKTIVSLMEYGLSEKE		-----SKASESFL--LAFTNLAMCYLALREYTKAVECDKALGLDSAN
FKBP52	270	STIVKRGTVYFKEGKYQKALLQYKKTIVSLMEYSEFSNEEAQKAQALR		-----LASHNLAMCHLKLQAFSAATESCNKALELDSNN
CYP40	223	TEELKNIGNTFFKSQNWEMAIKKYAEVLRYVDSSKAVLET		-----ADRAKLPPTALSCVNLIGACKLMSNWQGAIDSCLEALELDPNS
TOM34	193	ARVLKEBGNELVKGHNHKAIEKYSSELICSNLE		-----SATYSNRALCYLVILQKYTEAVKOCYTEALKLDGKN
TOM70	136	AAKLKELGNKAVGSKDFNKAIJLYSKAIICKPDP		-----VYYSNRACHNALAQWEQVWADTTAALKLDPHY
CNS1_sc	83	AENFRKQGNELKAKRFKDARELYSKGLAVECEDKSN		-----ESLYANRAACELELKNYRRCIEDCSKALTINPKN
TTC1	116	STRLEKEDNEQFKKGYDYTEAESYSRALVPCSPFOKER		-----SILFSNRRAARMQDKKEMAINDCSKAIQINPSY
TTC2	246	LKAKKEDENKAFKEGNYKLAVELTEALGIDPNNIKTN		-----AKLYCNRGVTVNBLKRLKLDLDAIEDCTNNAVKLDDTY
TTC3	231	GELMRKNGNEEF SKERFDALITYTRALVYRPEN		-----YLYGNRALCFRLTGQFRNALGDGKRATILKNYW
TTC4	79	AKTYKDBGNDYFKEKDYKKAIVISTEGLKCKKCADPDILN		-----AVLYTNRAAAQYVLGNFRSALNDVTAARKLKPCCH
IRSP	225	FKALKEBGNQVNDKNVYKDALSKYSECLIKNNKE		-----CATYTNRALCYLKLQCFEERAKQDCDQALQIADGN
SGT	89	AERLAKTEGNEQMKVENFEAAVHFYKGAIELNPAN		-----AVYFCNRRAAAYSKLGNVAGAVQDCERAICIDPAY
KIAA0719	114	AQAARKNGKTYFKAGKYEQAIQCYTEANISLCTPEKNVDL		-----STIFYQNRAAAFAEQIQKWEVAQDCITKAVELNPKY
TPR1	72	GKGYSRKMAALEFTANRFEAKRTYEDLKEHANNPQLKBLQNMEARLAERKM		125
CHIP	94	VKAHFTLGQOQLEMSYDEANLQRAYSLAKEQRLNFGDDIPSLRLIAKKGRW		147
TPR2A	300	AKAVARIQNSYFKKEKYKDAIHFYTKSLAEHR--TPDVLKQOQAEKILKEQERL		352
TPR2B	428	IKGYTRKMAALEAMKDYTKAMDVYQKALDLDSSCKEPADGYQRCMAQYNNRHS		481
PP5	96	IKGYVRRASNNMALGKFRALRDYETVWVKPHDKDAKMKYQECNKIVKQKAFE		149
FKBP51	351	ENGLYRRGEAQILMNEFEESAKGDFEKVLEVPQNKAAARLQISWCQKKAKEHNER		404
FKBP52	353	EXGLFRRGHHLAVNDFELARADFOKVLQLYPNNKAARTQLAVCOQIRIRQLAR		406
CYP40	307	TKALYVRRACQWQGLKEYDQALADLKAQGIAPEDKAIQAEILLKVQKIKAKQDK		400
TOM34	261	VKAIFYRRAQAHLKALDYKSSPADISNLLQIEPRNGPAQKLQEVKQNLH		309
TOM70	203	VKALNRRANAYDQLSRYREHALLDFTABSCIIDGFRNEQSAQAVERLLKFAENKA		256
CNS1_sc	155	VKCYRTSKAFQOLNKLKEAKSAANTANQRIIDPENKSIILMLSVIDRKEQELKA		208
TTC1	189	IRAILRRASLEYKTDKLDLEALDKSILEKOPSITHQAREACRRLPKQIEERNER		242
TTC2	318	IRAYLRRAQCYMDTEQYEEAVRDYKVVQTEKTEKHQQLKNAQLKELKSKRKD		371
TTC3	299	FKGHRYCDALSMGELYDMALQANIKAKLCKNDPEGIKDLIQQHVKLQKQIED		352
TTC4	151	LKATIRGALCHIELIHFAEANWCEBGLQIDAKEKGLLENRAKADKLKRIEQRD		204
IRSP	293	VKAIFYRRAALAHKGLKNYQKSLIDENKVIILDPSSIIIEAKMELLEVTRLLNLDKDT		346
SGT	159	SRAGYRGMLALSSLNKHVEAVYKKALEDIDPNETVKNLKAELKLEAPSP		212
KIAA0719	187	VKALFRRAKAHEKLDNKGCELEDVNAVCILEGFQNFQOQSMILLADKVLKGLGKEKA		240

Fig. 3A

	<u>HELIX 1A</u>	<u>HELIX 1B</u>
(1)	4 VNELKEKGNKALSVGNIDDALQCYSEAIKLDPHN	
(2)	225 ALKEKELGNDAYKKKDFDTALKHYDKAKELDPTN	_____
(3)	360 ALEEKNGNECFQKGDYPQAMKHYTEAIKRNPKE	_____

	<u>HELIX 2A</u>	<u>HELIX 2B</u>
(4)	HVLYSNRSAAYAKKGDYQKAYEDGCKTVDLKPDW	
(5)	-MTYITNQAAVYFEKGDYNKCRELCEKAIEVGRENREDYRQI	
(6)	-AKLYSNRAACYTKLLEFQLALKDCEECIQLEPTF	_____

	<u>HELIX 3A</u>	<u>HELIX 3B</u>
(7)	72 GKGYSRKAAAFLNRFEEAKRTYEEGLKHEA	
(8)	300 AKAYARIGNSYFKEEKYKDAIHFNKSLAEHR	
(9)	428 IKGYTRKAAALEAMKDYTKAMDVYQKALDLD	

Fig. 3B

	HELIX 1A	HELIX 1B	HELIX 2A	HELIX 2B
(1) TPR1	4 VNELKEKGNKALSVGNIDDDALQCYSEAIKLDPHN		HVLYSNRNSAAYAKKGDYQKAYEDGCKTVDLKPDW	
(2) TPR2A	225 ALKEKELGNDAYKKKDFDTALKHVDKAKELDPTN		MTYITNQAAVYFEKGDYNKCRELCEKAIEVGRENREDYRQI	
(3) TPR2B	360 ALEEKNKGNECFQKGDYPQAMKHYTEAIKRNPKD		AKLYSNRAACYTKLLEFQLALKDCEECIQLEPTF	
	HELIX 3A	HELIX 3B	HELIX 3C	
Forts. (1) TPR1	72 GKGYSRKAALAEFLNRFEEAKRTYEEGLKHEANNPQLKEGLQNMEARLAERKFM		125	
Forts. (2) TPR2A	300 AKAYARIGNSYFKEEKYKDAIHFYNKSLAEHR-TPDVLKCCQQAEEKILKEQERL		352	
Forts. (3) TPR2B	428 IKGYTRKAAALEAMKDYTKAMDVYQKALDLDSSCKEADGYQRCMMAQYNRHDS		481	

Figur 3C

TITEL
VERBINDUNG: MOL ID: 1;
VERBINDUNG 2MOLEKÜLE
STICHWÖRTER
EXPERIMENTELLE DATEN ROENTGENBEUGUNG
AUTOREN
DATUM DER VERSION
ZEITSCHRIFT AUTOR
ZEITSCHRIFT TITEL
ZEITSCHRIFT LITERATURSTELLE UNVEROEFFENTLICHT
ZEITSCHRIFT
BEMERKUNG 1
BEMERKUNG 2
BEMERKUNG 2 AUFLOESUNG 0.88Å
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 VERFEINERUNG
BEMERKUNG 3 PROGRAMM SHELXL-97
BEMERKUNG 3 AUTOREN G.M. SHELDRICK
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 BEI DER VERFEINERUNG VERWENDETE DATEN
BEMERKUNG 3 OBERE AUFLOESUNGSGRENZE 0.88Å
BEMERKUNG 3 UNTERE AUFLOESUNGSGRENZE 8 Å
BEMERKUNG 3 AUSSCHLUSSKRITERIUM (SIGMA(F)) 0
BEMERKUNG 3 VOLLSTAENDIGKEIT IM ANGEGEBENEN BEREICH 95,5%
BEMERKUNG 3 KREUZ-VALIDIERUNGSMETHODE: FREIER R WERT
BEMERKUNG 3 WAHL DES TESTDATENSATZES FUER FREIEN R WERT ZUFÄELLIG
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 UEBEREINSTIMMUNG MIT DEN IN DER VERFEINERUNG EINGESTEZTEN DATEN
(OHNE AUSSCHLUSS).
BEMERKUNG 3 R WERT (ARBEITS UND FREIER DATENSATZ, OHNE AUSSCHLUSS: 0,1058
BEMERKUNG 3 R WERT (ARBEITS DATENSATZ, OHNE AUSSCHLUSS 0,1048
BEMERKUNG 3 FREIER R WERT (OHNE AUSSCHLUSS) 0,1249
BEMERKUNG 3 GROESSE DES TESTDATENSATZES FUER DEN FREIEN R WERT (OHNE AUSSCHLUSS:
BEMERKUNG 3 ANZAHL DER REFLEXE IM TESTDATENSATZ (OHNE AUSSCHLUSS) 7554
BEMERKUNG 3 GESAMTZAHL DER REFLEXE (OHNE AUSSCHLUSS) 75220
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 UEBEREINSTIMMUNG DES MODELLS MIT DATEN $F > 4\text{SIG}(F)$
BEMERKUNG 3 R WERT (ARBEITS UND FREIER DATENSATZ, $F > 4\text{SIG}(F)$) 0.1034
BEMERKUNG 3 R WERT (ARBEITS DATENSATZ, $F > 4\text{SIG}(F)$) 0,1024
BEMERKUNG 3 FREIER R WERT, $F > 4\text{SIG}(F)$ 0,1218
BEMERKUNG 3 GROESSE DES TESTDATENSATZES FUER DEN FREIEN R WERT ($F > 4\text{SIG}(F)$) 10%
BEMERKUNG 3 ANZAHL DEWR REFLEXE IM TESTDATENSATZ ($F > 4\text{SIG}(F)$) 7042
BEMERKUNG 3 GESAMTZAHL DER REFLEXE ($F > 4\text{SIG}(F)$) 70566
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 ANZAHL DER NICHT WASSERSTOFFATOME IN DER VERFEINERUNG
BEMERKUNG 3 PROTEIN ATOME 996
BEMERKUNG 3 NUKLEINSAEUREATOME 0
BEMERKUNG 3 HOTEROATOME 0
BEMERKUNG 3 SOLVENSATOME 267
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 VERFEINERUNG DES MODELLS
BEMERKUNG 3 BESETZUNGSSUMME DER NICHTWASSERSTOFF ATOME 1215,0
BEMERKUNG 3 BESETZUNGSSUMME DER WASSERSTOFF ATOME 865,0
BEMERKUNG 3 ANZAHL DER UNGEORDNETEN RESTE 13
BEMERKUNG 3 ANZAHL DER LEAST SQUARE PARAMETER 11388
BEMERKUNG 3 ANZAHL DER RESTRAINTS 13550
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 RMS ABWEICHUNG VON DEN RESTRAINT ZIELWERTEN
BEMERKUNG 3 BINDUNGSLAENGEN 0,016Å
BEMERKUNG 3 WINKEL ENTFERNUNGEN 0,030Å
BEMERKUNG 3 AEHNLICHE ENTFERNUNGEN (OHNE ZIELWERT) 0,0Å

Fortsetzung Fig 3C

BEMERKUNG 3 ENTFERNUNGEN VON DEN RESTRAINT EBENEN 0,0204Å
BEMERKUNG 3 NULL CHIRALE VOLUMEN 0,103Å**3
BEMERKUNG 3 NICHT NULL CHIRALE VOLUMEN 0,089Å**3
BEMERKUNG 3 ANTI-BUMPING ENTFERNUNG RESTRAINTS 0,128Å
BEMERKUNG 3 FESTE BINDUNGEN ADP KOMPONENTEN 0,006Å**2
BEMERKUNG 3 AEHNLICHE ADP KOMPONENTEN 0,031Å**2
BEMERKUNG 3 ANNAEHERND ISOTROPE ADPS 0,085Å**2
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 MASSENSOLVES MODELLIERUNG
BEMERKUNG 3 EINGESETZTE METHODE: MOEWS & KRETSINGER, J. MOL. BIOL. 91
(1973) 201-228
BEMERKUNG 3 STEREOCHEMISCHE ZIELWETE: ENGH UND HUBER
BEMERKUNG 3 AUSNAHMEN:
BEMERKUNG 3
BEMERKUNG 3 WEITERE BEMERKUNGEN ZUR VERFEINERUNG:
BEMERKUNG 3 ANISOTROPE VERFEINERUNG VERMINDERTE DEN FREIEN R WERT (OHNE
AUSSCHLUSS) UM ?
BEMERKUNG 200
BEMERKUNG 200 EXPERIMENTELLE EINZELHEITEN
BEMERKUNG 200 ART DES EXPERIMENTS: ROENTGENBEUGUNG
BEMERKUNG 200 DATUM DER DATENSAMMLUNG
BEMERKUNG 200 TEMPERATUR (KELVIN)
BEMERKUNG 200 PH
BEMERKUNG 200 ANZAHL DER VERWENDETEN KRISTALLE
BEMERKUNG 200
BEMERKUNG 200 SYNCHROTRON (Y/N)
BEMERKUNG 200 STRAHLENQUELLE
BEMERKUNG 200 BEAMLINE
BEMERKUNG 200 MODELL DES ROENTGENGENERATORS
BEMERKUNG 200 MONOCHROMATISCH ODER LAUE (M/L) : M
BEMERKUNG 200 WELLENLAENGE ODER BEREICH
BEMERKUNG 200 MONOCHROMATOR
BEMERKUNG 200 OPTIK
BEMERKUNG 200
BEMERKUNG 200 ART DES DETEKTORS
BEMERKUNG 200 HERSTELLER DES DETEKTORS
BEMERKUNG 200 PROGRAMM ZUR INTEGRIERUNG DER INTENSITAETEN
BEMERKUNG 200 PROGRAMM ZUR SKALIERUNG DER DATEN
BEMERKUNG 200
BEMERKUNG 200 ANZAHL DER EINZIGARTIGEN REFLEXE
BEMERKUNG 200 OBERE AUFLÖSUNGSGRENZE
BEMERKUNG 200 UNTERE AUFLÖSUNGSGRENZE
BEMERKUNG 200 AUSSCHLUSSKRITERIUM (SIGMA/I): KEINES
BEMERKUNG 200
BEMERKUNG 200 UEBERALLS
BEMERKUNG 200 VOLLSTÄNDIGKEIT DES BEREICHS
BEMERKUNG 200 REDUNDANZ DER DATEN
BEMERKUNG 200 R MERGE
BEMERKUNG 200 R SYM: NULL
BEMERKUNG 200 <I/SIGMA(I)> FUER DEN DATENSATZ
BEMERKUNG 200 IN DER HOECHSTEN AUFLÖSUNGSSCHALE
BEMERKUNG 200 HOECHSTE AUFLÖSUNGSSCHALE, BEREICH HOCH (Å)
BEMERKUNG 200 HOECHSTE AUFLÖSUNGSSCHALE, BEREICH NIEDRIG (Å)
BEMERKUNG 200
BEMERKUNG 200 VOLLSTÄNDIGKEIT IN DER SCHALE
BEMERKUNG 200 DATEN REDUNDANZ IN DER SCHALE
BEMERKUNG 200 R MERGE IN DER SCHALE
BEMERKUNG 200 R SYM IN DER SCHALE : NULL
BEMERKUNG 200 <I/SIGMA(I)> FUER DIE SCHALE
BEMERKUNG 200
BEMERKUNG 200 METHODE DER STRUKTURLÖSUNG: AB INITIO
BEMERKUNG 200 VERWENDETES PROGRAMM: SHELX

Fortsetzung Fig. 3C

BEMERKUNG 200 AUSGANGSMODELL: KEINES

BEMERKUNG 200

BEMERKUNG 200 BEMERKUNG:

BEMERKUNG 280

BEMERKUNG 280 KRISTALL

BEMERKUNG 280 SOLVENS GEHALT, VS: 22,4%

BEMERKUNG 280 MATTHEWS KOEFFIZIENT, VM ($\text{\AA}^3/\text{DA}$) 1,59

BEMERKUNG 280

BEMERKUNG 280 KRISTALLISATIONSBEDINGUNGEN

BEMERKUNG 280

SEQRES	1	118	MET	GLU	GLN	VAL	ASN	GLU	LEU	LYS	GLU	LYS	GLY	ASN	LYS
SEQRES	2	118	ALA	LEU	SER	VAL	GLY	ASN	ILE	ASP	ASP	ALA	LEU	GLN	CYS
SEQRES	3	118	TYR	SER	GLU	ALA	ILE	LYS	LEU	ASP	PRO	HIS	ASN	HIS	VAL
SEQRES	4	118	LEU	TYR	SER	ASN	ARG	SER	ALA	ALA	TYR	ALA	LYS	LYS	GLY
SEQRES	5	118	ASP	TYR	GLN	LYS	ALA	TYR	GLU	ASP	GLY	CYS	LYS	THR	VAL

SEQRES	6	118	ASP LEU LYS PRO ASP TRP GLY LYS GLY TYR SER ARG LYS	
SEQRES	7	118	ALA ALA ALA LEU GLU PHE LEU ASN ARG PHE GLU GLU ALA	
SEQRES	8	118	LYS ARG THR TYR GLU GLY LEU LYS HIS GLU ALA ASN	
SEQRES	9	118	ASN PRO GLN LEU LYS GLU GLY LEU GLN ASN MET GLU ALA	
SEQRES	10	118	ARG	
CRYST1	31.062	43.621	38.101	90.00 101.74 90.00 P 21 4
ORIGX1	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
ORIGX2	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
ORIGX3	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000
SCALE1	0.032194	0.000000	0.006690	0.000000
SCALE2	0.000000	0.022925	0.000000	0.000000
SCALE3	0.000000	0.000000	0.026807	0.000000
ATOM	1	N	GLY	0 1.192 0.093 32.397 1.00 8.25 N
ANISOU	1	N	GLY	0 1144 958 1035 -100 430 220 N
ATOM	2	CA	GLY	0 -0.118 0.588 32.072 1.00 8.18 C
ANISOU	2	CA	GLY	0 1037 982 1088 43 545 276 C
ATOM	3	C	GLY	0 -0.057 1.478 30.855 1.00 7.16 C
ANISOU	3	C	GLY	0 1083 833 806 -64 436 58 C
ATOM	4	O	GLY	0 1.018 1.681 30.297 1.00 7.10 O
ANISOU	4	O	GLY	0 1006 775 914 -84 465 114 O
ATOM	5	N	MET	1 -1.217 2.013 30.461 1.00 7.45 N
ANISOU	5	N	MET	1 1068 856 909 -14 467 118 N
ATOM	6	CA	MET	1 -1.195 2.921 29.331 1.00 7.79 C
ANISOU	6	CA	MET	1 1181 861 917 50 506 166 C
ATOM	7	CB	MET	1 -2.618 3.271 28.918 1.00 9.06 C
ANISOU	7	CB	MET	1 1179 1229 1033 251 455 197 C
ATOM	8	CG	MET	1 -3.401 2.122 28.330 1.00 10.73 C
ANISOU	8	CG	MET	1 1253 1507 1317 85 232 269 C
ATOM	9	SD	MET	1 -2.527 1.186 27.072 1.00 12.86 S
ANISOU	9	SD	MET	1 1352 1803 1733 161 28 -474 S
ATOM	10	CE	MET	1 -2.270 2.498 25.883 1.00 15.18 C
ANISOU	10	CE	MET	1 1546 3076 1145 263 278 -168 C
ATOM	11	C	MET	1 -0.378 4.138 29.543 1.00 7.98 C
ANISOU	11	C	MET	1 1168 806 1060 117 626 170 C
ATOM	12	O	MET	1 0.145 4.683 28.581 1.00 8.29 O
ANISOU	12	O	MET	1 1254 877 1019 116 628 263 O
ATOM	13	N	GLU	2 -0.206 4.591 30.790 1.00 9.18 N
ANISOU	13	N	GLU	2 1557 807 1125 -92 903 8 N
ATOM	14	CA	GLU	2 0.691 5.710 31.005 1.00 10.94 C
ANISOU	14	CA	GLU	2 1937 805 1416 -286 1129 -205 C
ATOM	15	CB	GLU	2 0.668 6.082 32.470 1.00 17.65 C
ANISOU	15	CB	GLU	2 3152 1780 1773 -888 1607 -1023 C
ATOM	16	CG	GLU	2 1.773 6.914 33.063 1.00 24.54 C
ANISOU	16	CG	GLU	2 4539 2718 2067 -2113 1768 -1409 C
ATOM	17	CD	GLU	2 1.803 7.135 34.546 1.00 30.02 C
ANISOU	17	CD	GLU	2 6102 3283 2023 -2808 1738 -1425 C
ATOM	18	OE1	GLU	2 0.970 6.579 35.271 1.00 32.22 O
ANISOU	18	OE1	GLU	2 7041 3025 2175 -2731 2287 -1300 O
ATOM	19	OE2	GLU	2 2.688 7.933 34.976 1.00 41.67 O
ANISOU	19	OE2	GLU	2 8179 5544 2109 -4701 1235 -1161 O
ATOM	20	C	GLU	2 2.083 5.402 30.472 1.00 9.14 C
ANISOU	20	C	GLU	2 1644 855 974 -325 667 -199 C
ATOM	21	O	GLU	2 2.710 6.200 29.778 1.00 9.41 O
ANISOU	21	O	GLU	2 1593 815 1168 -339 737 -137 O
ATOM	22	N	GLN	3 2.595 4.215 30.869 1.00 8.85 N
ANISOU	22	N	GLN	3 1645 928 790 -321 491 -168 N
ATOM	23	CA	GLN	3 3.925 3.832 30.458 1.00 8.89 C
ANISOU	23	CA	GLN	3 1532 973 873 -293 299 -113 C
ATOM	24	CB	GLN	3 4.380 2.580 31.253 1.00 11.08 C
ANISOU	24	CB	GLN	3 1909 1300 1002 -273 -66 -54 C
ATOM	25	CG	GLN	3 4.702 2.846 32.709 1.00 17.59 C
ANISOU	25	CG	GLN	3 2970 2781 933 -1116 -152 220 C
ATOM	26	CD	GLN	3 4.775 1.741 33.684 1.00 29.02 C
ANISOU	26	CD	GLN	3 4838 4166 2021 -1129 -698 1382 C
ATOM	27	OE1	GLN	3 3.811 1.058 34.054 1.00 41.85 O
ANISOU	27	OE1	GLN	3 6215 5016 4670 -1325 477 3126 O
ATOM	28	NE2	GLN	3 5.950 1.480 34.306 1.00 41.87 N
ANISOU	28	NE2	GLN	3 6277 5477 4154 131 -2127 1651 N
ATOM	29	C	GLN	3 3.999 3.536 28.956 1.00 7.33 C

Forts. Fig 3C

10/137

Forts. Fig. 3c

ANISOU	29	C	GLN	3	1081	869	834	-222	287	-109	C
ATOM	30	O	GLN	3	4.968	3.884	28.298	1.00	7.89		O
ANISOU	30	O	GLN	3	1035	1017	944	-268	283	-115	O
ATOM	31	N	VAL	4	2.964	2.867	28.437	1.00	6.19		N
ANISOU	31	N	VAL	4	876	717	760	-127	318	-54	N
ATOM	32	CA	VAL	4	2.915	2.615	27.013	1.00	6.32		C
ANISOU	32	CA	VAL	4	844	729	830	-49	296	-119	C
ATOM	33	CB	VAL	4	1.657	1.815	26.679	1.00	6.18		C
ANISOU	33	CB	VAL	4	753	743	854	-52	290	-79	C
ATOM	34	CG1	VAL	4	1.430	1.718	25.189	1.00	8.15		C
ANISOU	34	CG1	VAL	4	944	1220	934	11	196	-289	C
ATOM	35	CG2	VAL	4	1.705	0.429	27.326	1.00	8.18		C
ANISOU	35	CG2	VAL	4	1238	683	1188	-132	363	-70	C
ATOM	36	C	VAL	4	2.985	3.906	26.220	1.00	6.22		C
ANISOU	36	C	VAL	4	815	770	780	-109	301	-62	C
ATOM	37	O	VAL	4	3.749	4.037	25.267	1.00	6.42		O
ANISOU	37	O	VAL	4	853	812	776	-106	364	-113	O
ATOM	38	N	ASN	5	2.155	4.861	26.629	1.00	6.24		N
ANISOU	38	N	ASN	5	947	704	722	-12	395	28	N
ATOM	39	CA	ASN	5	2.039	6.114	25.904	1.00	6.92		C
ANISOU	39	CA	ASN	5	980	825	824	3	416	104	C
ATOM	40	CB	ASN	5	0.781	6.853	26.277	1.00	7.89		C
ANISOU	40	CB	ASN	5	981	900	1116	123	542	169	C
ATOM	41	CG	ASN	5	-0.446	6.159	25.647	1.00	10.08		C
ANISOU	41	CG	ASN	5	1019	1631	1178	193	337	309	C
ATOM	42	OD1	ASN	5	-0.371	5.471	24.662	1.00	12.67		O
ANISOU	42	OD1	ASN	5	1072	2469	1271	-142	159	-91	O
ATOM	43	ND2	ASN	5	-1.593	6.365	26.289	1.00	11.32		N
ANISOU	43	ND2	ASN	5	856	1860	1586	209	310	449	N
ATOM	44	C	ASN	5	3.283	6.955	26.092	1.00	6.58		C
ANISOU	44	C	ASN	5	952	699	848	-6	477	43	C
ATOM	45	O	ASN	5	3.658	7.703	25.153	1.00	7.48		O
ANISOU	45	O	ASN	5	1161	788	894	-11	484	55	O
ATOM	46	N	GLU	6	3.962	6.859	27.220	1.00	6.88		N
ANISOU	46	N	GLU	6	1102	748	764	-73	447	-114	N
ATOM	47	CA	GLU	6	5.228	7.570	27.332	1.00	7.38		C
ANISOU	47	CA	GLU	6	1138	836	831	-199	401	-164	C
ATOM	48	CB	GLU	6	5.741	7.419	28.752	1.00	8.52		C
ANISOU	48	CB	GLU	6	1348	1131	759	-116	339	-210	C
ATOM	49	CG	AGLU	6	5.181	8.375	29.775	0.57	10.66		C
ANISOU	49	CG	AGLU	6	1576	1337	1138	-339	535	-567	C
ATOM	50	CG	BGLU	6	7.116	7.949	28.960	0.43	14.27		C
ANISOU	50	CG	BGLU	6	2208	1620	1594	-1121	-296	-451	C
ATOM	51	CD	AGLU	6	5.755	8.083	31.132	0.57	14.96		C
ANISOU	51	CD	AGLU	6	2138	2508	1039	-129	414	-822	C
ATOM	52	CD	BGLU	6	7.480	7.763	30.419	0.43	16.59		C
ANISOU	52	CD	BGLU	6	1991	2700	1611	-888	-260	-140	C
ATOM	53	OE1	AGLU	6	5.255	7.139	31.787	0.57	22.80		O
ANISOU	53	OE1	AGLU	6	3409	3344	1911	-455	-662	618	O
ATOM	54	OE1	BGLU	6	8.407	6.986	30.731	0.43	24.11		O
ANISOU	54	OE1	BGLU	6	3631	3277	2252	231	-120	540	O
ATOM	55	OE2	AGLU	6	6.661	8.803	31.582	0.57	26.72		O
ANISOU	55	OE2	AGLU	6	4156	3272	2723	-984	-1545	-228	O
ATOM	56	OE2	BGLU	6	6.776	8.396	31.225	0.43	20.46		O
ANISOU	56	OE2	BGLU	6	2631	3574	1568	-411	-743	-822	O
ATOM	57	C	GLU	6	6.220	7.062	26.329	1.00	6.91		C
ANISOU	57	C	GLU	6	1126	665	835	-134	370	-85	C
ATOM	58	O	GLU	6	6.952	7.840	25.708	1.00	7.32		O
ANISOU	58	O	GLU	6	1184	711	887	-180	485	-107	O
ATOM	59	N	LEU	7	6.283	5.741	26.138	1.00	6.38		N
ANISOU	59	N	LEU	7	879	752	794	-129	297	-76	N
ATOM	60	CA	LEU	7	7.194	5.172	25.156	1.00	6.24		C
ANISOU	60	CA	LEU	7	839	752	779	-113	310	-90	C
ATOM	61	CB	LEU	7	7.300	3.661	25.359	1.00	6.16		C
ANISOU	61	CB	LEU	7	823	748	770	-126	205	-98	C
ATOM	62	CG	LEU	7	8.151	3.248	26.552	1.00	8.01		C
ANISOU	62	CG	LEU	7	1115	965	964	-29	15	-138	C
ATOM	63	CD1	LEU	7	7.831	1.830	26.987	1.00	8.69		C
ANISOU	63	CD1	LEU	7	1362	963	974	146	114	-83	C

11/137

Forb. Fig. 3c

ATOM	64	CD2	LEU	7	9.625	3.448	26.217	1.00	10.73		C
ANISOU	64	CD2	LEU	7	1063	1126	1887	-29	-169	-71	C
ATOM	65	C	LEU	7	6.779	5.520	23.745	1.00	6.38		C
ANISOU	65	C	LEU	7	870	782	772	-66	373	-70	C
ATOM	66	O	LEU	7	7.627	5.798	22.887	1.00	6.67		O
ANISOU	66	O	LEU	7	862	828	844	-84	404	-65	O
ATOM	67	N	LYS	8	5.483	5.496	23.460	1.00	6.36		N
ANISOU	67	N	LYS	8	859	885	673	-196	339	-96	N
ATOM	68	CA	LYS	8	5.009	5.903	22.161	1.00	6.37		C
ANISOU	68	CA	LYS	8	881	795	742	-146	339	-64	C
ATOM	69	CB	LYS	8	3.494	5.747	22.103	1.00	6.88		C
ANISOU	69	CB	LYS	8	800	948	866	-92	271	-69	C
ATOM	70	CG	LYS	8	2.911	6.054	20.743	1.00	8.49		C
ANISOU	70	CG	LYS	8	1072	1252	900	56	228	-114	C
ATOM	71	CD	LYS	8	1.401	5.791	20.664	1.00	10.07		C
ANISOU	71	CD	LYS	8	984	1602	1241	93	-3	-42	C
ATOM	72	CE	LYS	8	0.566	6.669	21.545	1.00	12.99		C
ANISOU	72	CE	LYS	8	1213	1876	1848	499	-66	-319	C
ATOM	73	NZ	LYS	8	-0.901	6.422	21.354	1.00	14.54		N
ANISOU	73	NZ	LYS	8	1222	2390	1912	262	251	-595	N
ATOM	74	C	LYS	8	5.436	7.331	21.827	1.00	6.49		C
ANISOU	74	C	LYS	8	922	805	740	-158	280	-107	C
ATOM	75	O	LYS	8	5.889	7.605	20.742	1.00	7.26		O
ANISOU	75	O	LYS	8	1066	854	838	-165	459	-82	O
ATOM	76	N	GLU	9	5.266	8.212	22.804	1.00	6.39		N
ANISOU	76	N	GLU	9	917	740	770	-117	415	-38	N
ATOM	77	CA	GLU	9	5.674	9.604	22.602	1.00	6.86		C
ANISOU	77	CA	GLU	9	918	745	944	-62	423	-31	C
ATOM	78	CB	GLU	9	5.141	10.451	23.747	1.00	7.00		C
ANISOU	78	CB	GLU	9	905	804	948	-29	444	-61	C
ATOM	79	CG	GLU	9	5.625	11.904	23.666	1.00	7.20		C
ANISOU	79	CG	GLU	9	889	838	1008	23	395	-123	C
ATOM	80	CD	GLU	9	5.145	12.695	22.487	1.00	7.88		C
ANISOU	80	CD	GLU	9	1055	861	1077	-45	356	-1	C
ATOM	81	OE1	GLU	9	4.145	12.332	21.847	1.00	10.47		O
ANISOU	81	OE1	GLU	9	1201	1342	1435	-176	13	233	O
ATOM	82	OE2	GLU	9	5.774	13.732	22.231	1.00	9.33		O
ANISOU	82	OE2	GLU	9	1215	988	1341	-52	306	96	O
ATOM	83	C	GLU	9	7.182	9.722	22.440	1.00	6.40		C
ANISOU	83	C	GLU	9	906	713	811	-32	432	-56	C
ATOM	84	O	GLU	9	7.634	10.513	21.610	1.00	7.09		O
ANISOU	84	O	GLU	9	999	728	966	-21	500	2	O
ATOM	85	N	LYS	10	7.953	8.954	23.169	1.00	6.60		N
ANISOU	85	N	LYS	10	844	851	813	-115	384	-71	N
ATOM	86	CA	LYS	10	9.392	8.969	22.969	1.00	6.32		C
ANISOU	86	CA	LYS	10	888	776	738	-142	287	-33	C
ATOM	87	CB	LYS	10	10.125	8.068	23.964	1.00	7.51		C
ANISOU	87	CB	LYS	10	1104	1030	722	-170	129	-8	C
ATOM	88	CG	LYS	10	10.241	8.600	25.373	1.00	11.39		C
ANISOU	88	CG	LYS	10	1537	2071	722	-156	122	-264	C
ATOM	89	CD	LYS	10	11.035	7.709	26.290	1.00	15.60		C
ANISOU	89	CD	LYS	10	2101	2823	1003	-133	-297	52	C
ATOM	90	CE	LYS	10	12.452	7.448	25.900	1.00	24.32		C
ANISOU	90	CE	LYS	10	2185	4221	2836	672	-504	-55	C
ATOM	91	NZ	LYS	10	13.458	8.523	26.130	1.00	42.61		N
ANISOU	91	NZ	LYS	10	2745	7505	5942	-1809	-1968	2830	N
ATOM	92	C	LYS	10	9.719	8.559	21.538	1.00	6.09		C
ANISOU	92	C	LYS	10	812	743	758	-97	340	-23	C
ATOM	93	O	LYS	10	10.613	9.111	20.921	1.00	6.38		O
ANISOU	93	O	LYS	10	865	740	821	-122	332	-9	O
ATOM	94	N	GLY	11	9.008	7.553	21.021	1.00	6.21		N
ANISOU	94	N	GLY	11	829	807	724	-161	364	-33	N
ATOM	95	CA	GLY	11	9.255	7.169	19.667	1.00	6.01		C
ANISOU	95	CA	GLY	11	857	678	751	-47	280	-48	C
ATOM	96	C	GLY	11	8.903	8.258	18.686	1.00	5.95		C
ANISOU	96	C	GLY	11	763	804	694	-9	283	-40	C
ATOM	97	O	GLY	11	9.658	8.533	17.735	1.00	6.44		O
ANISOU	97	O	GLY	11	829	851	766	-39	320	26	O
ATOM	98	N	ASN	12	7.788	8.935	18.919	1.00	6.58		N

12/137

Forb. Fig. 3c

ANISOU	98	N	ASN	12	838	882	780	8	317	0	N
ATOM	99	CA	ASN	12	7.441	10.070	18.085	1.00	7.65		C
ANISOU	99	CA	ASN	12	883	1155	868	215	236	120	C
ATOM	100	CB	ASN	12	6.088	10.608	18.518	1.00	10.11		C
ANISOU	100	CB	ASN	12	1010	1435	1398	374	535	223	C
ATOM	101	CG	ASN	12	4.948	9.729	18.406	1.00	13.32		C
ANISOU	101	CG	ASN	12	1034	2391	1637	-25	59	585	C
ATOM	102	OD1	ASN	12	3.853	9.720	19.002	1.00	17.26		O
ANISOU	102	OD1	ASN	12	1122	1989	3445	338	699	300	O
ATOM	103	ND2	ASN	12	4.826	9.095	17.380	1.00	23.15		N
ANISOU	103	ND2	ASN	12	1576	5006	2213	-1145	158	-655	N
ATOM	104	C	ASN	12	8.490	11.158	18.108	1.00	7.36		C
ANISOU	104	C	ASN	12	1003	916	876	209	338	116	C
ATOM	105	O	ASN	12	8.822	11.726	17.087	1.00	8.28		O
ANISOU	105	O	ASN	12	1097	985	1065	154	463	273	O
ATOM	106	N	LYS	13	9.014	11.448	19.280	1.00	7.15		N
ANISOU	106	N	LYS	13	971	801	942	23	480	99	N
ATOM	107	CA	LYS	13	10.062	12.445	19.394	1.00	7.35		C
ANISOU	107	CA	LYS	13	1087	643	1064	-11	507	75	C
ATOM	108	CB	LYS	13	10.403	12.752	20.824	1.00	8.46		C
ANISOU	108	CB	LYS	13	1249	829	1138	-181	551	-143	C
ATOM	109	CG	LYS	13	9.328	13.602	21.466	1.00	8.71		C
ANISOU	109	CG	LYS	13	1255	717	1339	-74	612	-113	C
ATOM	110	CD	LYS	13	9.903	14.400	22.600	1.00	9.24		C
ANISOU	110	CD	LYS	13	1175	917	1420	-207	674	-217	C
ATOM	111	CE	LYS	13	8.884	15.313	23.241	1.00	9.41		C
ANISOU	111	CE	LYS	13	1315	885	1376	-218	662	-203	C
ATOM	112	NZ	LYS	13	7.820	14.522	23.895	1.00	8.87		N
ANISOU	112	NZ	LYS	13	1293	833	1244	-66	603	-151	N
ATOM	113	C	LYS	13	11.331	12.017	18.652	1.00	6.50		C
ANISOU	113	C	LYS	13	1043	576	849	-19	397	26	C
ATOM	114	O	LYS	13	12.023	12.866	18.074	1.00	7.12		O
ANISOU	114	O	LYS	13	990	758	957	40	431	70	O
ATOM	115	N	ALA	14	11.643	10.725	18.684	1.00	5.95		N
ANISOU	115	N	ALA	14	849	654	756	0	363	-48	N
ATOM	116	CA	ALA	14	12.814	10.271	17.936	1.00	6.03		C
ANISOU	116	CA	ALA	14	827	698	766	-3	280	-42	C
ATOM	117	CB	ALA	14	13.014	8.794	18.239	1.00	5.91		C
ANISOU	117	CB	ALA	14	807	629	808	-36	223	-10	C
ATOM	118	C	ALA	14	12.622	10.516	16.462	1.00	5.66		C
ANISOU	118	C	ALA	14	736	684	731	-57	279	26	C
ATOM	119	O	ALA	14	13.531	10.933	15.749	1.00	6.02		O
ANISOU	119	O	ALA	14	787	733	767	-89	287	23	O
ATOM	120	N	LEU	15	11.395	10.308	15.942	1.00	5.86		N
ANISOU	120	N	LEU	15	765	785	677	-79	321	-13	N
ATOM	121	CA	LEU	15	11.136	10.640	14.544	1.00	6.12		C
ANISOU	121	CA	LEU	15	758	750	817	-12	114	70	C
ATOM	122	CB	LEU	15	9.728	10.281	14.109	1.00	6.75		C
ANISOU	122	CB	LEU	15	807	903	857	-120	163	87	C
ATOM	123	CG	LEU	15	9.401	8.807	14.156	1.00	7.07		C
ANISOU	123	CG	LEU	15	747	1032	907	-147	123	67	C
ATOM	124	CD1	LEU	15	7.926	8.635	13.857	1.00	9.91		C
ANISOU	124	CD1	LEU	15	983	1248	1533	-354	-4	-43	C
ATOM	125	CD2	LEU	15	10.236	8.002	13.213	1.00	8.08		C
ANISOU	125	CD2	LEU	15	1161	1020	889	-158	97	-12	C
ATOM	126	C	LEU	15	11.404	12.101	14.305	1.00	6.54		C
ANISOU	126	C	LEU	15	776	860	849	-90	184	45	C
ATOM	127	O	LEU	15	11.939	12.488	13.260	1.00	7.10		O
ANISOU	127	O	LEU	15	964	922	812	-108	238	86	O
ATOM	128	N	SER	16	11.015	12.965	15.228	1.00	6.53		N
ANISOU	128	N	SER	16	799	846	835	-28	258	115	N
ATOM	129	CA	SER	16	11.190	14.412	15.013	1.00	6.81		C
ANISOU	129	CA	SER	16	837	786	964	79	290	164	C
ATOM	130	CB	ASER	16	10.492	15.181	16.127	0.78	7.54		C
ANISOU	130	CB	ASER	16	938	860	1065	25	227	-5	C
ATOM	131	CB	BSER	16	10.408	15.179	16.091	0.22	8.37		C
ANISOU	131	CB	BSER	16	1127	880	1172	249	498	187	C
ATOM	132	OG	ASER	16	9.110	14.975	16.042	0.78	7.85		O
ANISOU	132	OG	ASER	16	818	958	1208	-26	328	47	O

Forb. Fig. 3c

ATOM	133	OG	BSER	16	11.202	15.338	17.253	0.22	11.73		O
ANISOU	133	OG	BSER	16	1926	1333	1199	-314	352	-212	O
ATOM	134	C	SER	16	12.638	14.834	14.965	1.00	6.56		C
ANISOU	134	C	SER	16	867	838	786	26	284	79	C
ATOM	135	O	SER	16	12.911	15.891	14.401	1.00	8.34		O
ANISOU	135	O	SER	16	1081	878	1208	-20	353	236	O
ATOM	136	N	VAL	17	13.562	14.059	15.541	1.00	6.56		N
ANISOU	136	N	VAL	17	832	825	833	15	295	94	N
ATOM	137	CA	VAL	17	14.975	14.342	15.402	1.00	6.71		C
ANISOU	137	CA	VAL	17	875	793	882	-205	283	70	C
ATOM	138	CB	VAL	17	15.755	14.396	16.732	1.00	6.84		C
ANISOU	138	CB	VAL	17	808	806	984	-150	221	-89	C
ATOM	139	CG1	VAL	17	15.315	15.624	17.533	1.00	8.40		C
ANISOU	139	CG1	VAL	17	1241	807	1143	-247	337	-152	C
ATOM	140	CG2	VAL	17	15.607	13.097	17.520	1.00	7.12		C
ANISOU	140	CG2	VAL	17	957	804	946	-143	152	-30	C
ATOM	141	C	VAL	17	15.646	13.436	14.413	1.00	6.78		C
ANISOU	141	C	VAL	17	841	815	919	-54	305	149	C
ATOM	142	O	VAL	17	16.871	13.387	14.286	1.00	7.36		O
ANISOU	142	O	VAL	17	874	906	1016	-118	309	46	O
ATOM	143	N	GLY	18	14.862	12.719	13.570	1.00	6.68		N
ANISOU	143	N	GLY	18	937	885	716	-36	263	70	N
ATOM	144	CA	GLY	18	15.433	11.937	12.530	1.00	7.56		C
ANISOU	144	CA	GLY	18	1105	994	772	6	320	105	C
ATOM	145	C	GLY	18	16.082	10.644	12.945	1.00	7.00		C
ANISOU	145	C	GLY	18	926	937	796	40	260	-16	C
ATOM	146	O	GLY	18	16.878	10.111	12.172	1.00	9.84		O
ANISOU	146	O	GLY	18	1361	1510	868	464	384	19	O
ATOM	147	N	ASN	19	15.809	10.149	14.140	1.00	5.57		N
ANISOU	147	N	ASN	19	695	651	772	-63	237	-42	N
ATOM	148	CA	ASN	19	16.427	8.933	14.614	1.00	5.92		C
ANISOU	148	CA	ASN	19	685	710	857	-164	277	-131	C
ATOM	149	CB	ASN	19	17.014	9.108	16.000	1.00	6.73		C
ANISOU	149	CB	ASN	19	740	777	1038	-195	-8	-74	C
ATOM	150	CG	ASN	19	17.887	7.976	16.400	1.00	7.93		C
ANISOU	150	CG	ASN	19	692	1001	1322	-229	33	81	C
ATOM	151	OD1	ASN	19	17.782	6.880	15.861	1.00	7.69		O
ANISOU	151	OD1	ASN	19	829	887	1205	-111	159	101	O
ATOM	152	ND2	ASN	19	18.741	8.221	17.362	1.00	11.39		N
ANISOU	152	ND2	ASN	19	1238	1301	1790	-145	-518	41	N
ATOM	153	C	ASN	19	15.395	7.808	14.572	1.00	5.56		C
ANISOU	153	C	ASN	19	662	664	788	-101	185	-97	C
ATOM	154	O	ASN	19	14.723	7.496	15.538	1.00	5.51		O
ANISOU	154	O	ASN	19	694	679	721	-185	220	-36	O
ATOM	155	N	ILE	20	15.244	7.244	13.362	1.00	5.39		N
ANISOU	155	N	ILE	20	655	723	669	-159	194	-50	N
ATOM	156	CA	ILE	20	14.205	6.235	13.202	1.00	5.15		C
ANISOU	156	CA	ILE	20	539	763	655	-100	215	-92	C
ATOM	157	CB	ILE	20	13.902	5.976	11.707	1.00	5.75		C
ANISOU	157	CB	ILE	20	746	759	679	-104	161	-107	C
ATOM	158	CG2	ILE	20	12.757	5.010	11.603	1.00	6.48		C
ANISOU	158	CG2	ILE	20	727	913	823	-115	121	-149	C
ATOM	159	CG1	ILE	20	13.581	7.272	10.983	1.00	6.90		C
ANISOU	159	CG1	ILE	20	972	851	798	13	134	85	C
ATOM	160	CD1	ILE	20	13.468	7.131	9.480	1.00	7.75		C
ANISOU	160	CD1	ILE	20	1129	1006	811	-8	42	48	C
ATOM	161	C	ILE	20	14.535	4.973	13.962	1.00	5.04		C
ANISOU	161	C	ILE	20	632	643	640	-125	212	-125	C
ATOM	162	O	ILE	20	13.636	4.330	14.485	1.00	5.31		O
ANISOU	162	O	ILE	20	582	727	708	-148	145	-47	O
ATOM	163	N	ASP	21	15.806	4.642	14.105	1.00	5.37		N
ANISOU	163	N	ASP	21	584	736	721	-104	230	-25	N
ATOM	164	CA	ASP	21	16.142	3.455	14.871	1.00	5.50		C
ANISOU	164	CA	ASP	21	560	730	801	-104	200	-1	C
ATOM	165	CB	ASP	21	17.624	3.146	14.832	1.00	6.60		C
ANISOU	165	CB	ASP	21	635	1027	846	-3	193	137	C
ATOM	166	CG	ASP	21	18.043	2.562	13.494	1.00	7.92		C
ANISOU	166	CG	ASP	21	851	1132	1025	310	303	43	C
ATOM	167	OD1	ASP	21	19.281	2.441	13.317	1.00	10.02		O

Forb. Fig. 3c

ANISOU	167	OD1	ASP	21	832	1391	1586	168	542	-87	O
ATOM	168	OD2	ASP	21	17.194	2.242	12.700	1.00	12.99		O
ANISOU	168	OD2	ASP	21	968	2869	1097	755	58	-654	O
ATOM	169	C	ASP	21	15.694	3.616	16.324	1.00	5.57		C
ANISOU	169	C	ASP	21	560	822	736	-117	137	-81	C
ATOM	170	O	ASP	21	15.211	2.677	16.941	1.00	5.76		O
ANISOU	170	O	ASP	21	654	711	822	-149	205	-27	O
ATOM	171	N	ASP	22	15.886	4.819	16.906	1.00	5.53		N
ANISOU	171	N	ASP	22	595	751	754	-113	173	-75	N
ATOM	172	CA	ASP	22	15.412	5.049	18.265	1.00	5.94		C
ANISOU	172	CA	ASP	22	692	836	729	-151	87	-71	C
ATOM	173	CB	AASP	22	15.968	6.358	18.782	0.66	6.91		C
ANISOU	173	CB	AASP	22	814	938	875	-324	41	-64	C
ATOM	174	CB	BASP	22	15.864	6.405	18.774	0.34	6.99		C
ANISOU	174	CB	BASP	22	775	994	887	-233	70	-227	C
ATOM	175	CG	AASP	22	15.622	6.620	20.234	0.66	7.78		C
ANISOU	175	CG	AASP	22	1069	971	917	-181	-117	-81	C
ATOM	176	CG	BASP	22	17.292	6.438	19.271	0.34	9.50		C
ANISOU	176	CG	BASP	22	959	1150	1502	-362	-266	-19	C
ATOM	177	OD1AASP		22	15.606	5.667	21.045	0.66	10.18		O
ANISOU	177	OD1AASP		22	1842	1217	811	-542	58	-23	O
ATOM	178	OD1BASP		22	18.000	5.454	19.076	0.34	9.67		O
ANISOU	178	OD1BASP		22	802	1527	1345	-125	53	476	O
ATOM	179	OD2AASP		22	15.439	7.803	20.583	0.66	11.02		O
ANISOU	179	OD2AASP		22	1960	1126	1102	-43	136	-230	O
ATOM	180	OD2BASP		22	17.649	7.478	19.848	0.34	14.31		O
ANISOU	180	OD2BASP		22	1741	1681	2014	-738	-717	-298	O
ATOM	181	C	ASP	22	13.895	4.960	18.299	1.00	5.68		C
ANISOU	181	C	ASP	22	720	730	707	-171	160	-107	C
ATOM	182	O	ASP	22	13.304	4.426	19.251	1.00	6.02		O
ANISOU	182	O	ASP	22	715	867	706	-189	131	-3	O
ATOM	183	N	ALA	23	13.235	5.508	17.294	1.00	5.12		N
ANISOU	183	N	ALA	23	700	576	668	11	203	-49	N
ATOM	184	CA	ALA	23	11.778	5.403	17.281	1.00	5.21		C
ANISOU	184	CA	ALA	23	660	633	686	-43	227	-25	C
ATOM	185	CB	ALA	23	11.201	6.104	16.059	1.00	5.86		C
ANISOU	185	CB	ALA	23	840	603	785	29	179	126	C
ATOM	186	C	ALA	23	11.321	3.948	17.299	1.00	5.08		C
ANISOU	186	C	ALA	23	593	662	674	-31	197	-18	C
ATOM	187	O	ALA	23	10.421	3.568	18.034	1.00	5.22		O
ANISOU	187	O	ALA	23	609	758	616	-19	169	17	O
ATOM	188	N	LEU	24	11.940	3.139	16.451	1.00	4.94		N
ANISOU	188	N	LEU	24	592	613	673	-97	248	-48	N
ATOM	189	CA	LEU	24	11.622	1.713	16.380	1.00	4.71		C
ANISOU	189	CA	LEU	24	506	641	643	-71	125	-69	C
ATOM	190	CB	LEU	24	12.461	1.041	15.279	1.00	4.81		C
ANISOU	190	CB	LEU	24	452	667	706	-58	140	-71	C
ATOM	191	CG	LEU	24	12.105	1.491	13.888	1.00	5.27		C
ANISOU	191	CG	LEU	24	673	667	663	-180	209	-134	C
ATOM	192	CD1	LEU	24	13.169	1.041	12.888	1.00	6.05		C
ANISOU	192	CD1	LEU	24	647	1000	651	-127	203	-164	C
ATOM	193	CD2	LEU	24	10.737	0.985	13.440	1.00	5.91		C
ANISOU	193	CD2	LEU	24	557	917	772	-36	143	-77	C
ATOM	194	C	LEU	24	11.850	1.048	17.721	1.00	4.66		C
ANISOU	194	C	LEU	24	592	595	583	-31	158	-68	C
ATOM	195	O	LEU	24	11.045	0.210	18.143	1.00	5.32		O
ANISOU	195	O	LEU	24	646	666	712	-72	233	-18	O
ATOM	196	N	GLN	25	12.939	1.394	18.392	1.00	5.10		N
ANISOU	196	N	GLN	25	586	700	651	19	108	7	N
ATOM	197	CA	GLN	25	13.210	0.831	19.691	1.00	5.40		C
ANISOU	197	CA	GLN	25	649	715	686	-39	65	-7	C
ATOM	198	CB	GLN	25	14.582	1.364	20.156	1.00	6.79		C
ANISOU	198	CB	GLN	25	689	1156	735	0	66	92	C
ATOM	199	CG	GLN	25	14.994	0.781	21.501	1.00	8.63		C
ANISOU	199	CG	GLN	25	879	1491	910	37	-33	210	C
ATOM	200	CD	GLN	25	16.065	1.670	22.106	1.00	10.63		C
ANISOU	200	CD	GLN	25	962	2094	984	-55	-142	350	C
ATOM	201	OE1	GLN	25	17.136	1.863	21.482	1.00	12.11		O
ANISOU	201	OE1	GLN	25	855	2336	1409	-158	-97	321	O

7 Forb. Fig. 3c

ATOM	202	NE2	GLN	25	15.804	2.205	23.303	1.00	11.01		N
ANISOU	202	NE2	GLN	25	1301	1685	1197	-68	-135	102	N
ATOM	203	C	GLN	25	12.127	1.194	20.673	1.00	5.18		C
ANISOU	203	C	GLN	25	602	692	673	-105	85	-42	C
ATOM	204	O	GLN	25	11.652	0.336	21.423	1.00	5.59		O
ANISOU	204	O	GLN	25	756	666	702	-47	176	-40	O
ATOM	205	N	CYS	26	11.756	2.442	20.704	1.00	5.24		N
ANISOU	205	N	CYS	26	643	670	680	-120	118	-61	N
ATOM	206	CA	CYS	26	10.733	2.885	21.660	1.00	5.27		C
ANISOU	206	CA	CYS	26	666	767	569	-76	118	-73	C
ATOM	207	CB	CYS	26	10.561	4.412	21.567	1.00	6.36		C
ANISOU	207	CB	CYS	26	911	653	851	-71	313	-149	C
ATOM	208	SG	CYS	26	11.947	5.346	22.203	1.00	8.74		S
ANISOU	208	SG	CYS	26	1203	945	1175	-386	449	-381	S
ATOM	209	C	CYS	26	9.402	2.217	21.387	1.00	4.82		C
ANISOU	209	C	CYS	26	577	621	632	-13	146	-23	C
ATOM	210	O	CYS	26	8.721	1.792	22.311	1.00	5.16		O
ANISOU	210	O	CYS	26	675	727	558	-35	197	-16	O
ATOM	211	N	TYR	27	9.002	2.124	20.105	1.00	5.00		N
ANISOU	211	N	TYR	27	569	739	591	-15	185	-21	N
ATOM	212	CA	TYR	27	7.756	1.449	19.807	1.00	4.79		C
ANISOU	212	CA	TYR	27	490	726	603	20	170	55	C
ATOM	213	CB	TYR	27	7.394	1.605	18.339	1.00	5.20		C
ANISOU	213	CB	TYR	27	617	789	568	70	124	-10	C
ATOM	214	CG	TYR	27	7.139	3.009	17.851	1.00	5.48		C
ANISOU	214	CG	TYR	27	609	817	655	58	49	7	C
ATOM	215	CD1	TYR	27	6.514	3.967	18.614	1.00	6.28		C
ANISOU	215	CD1	TYR	27	849	855	682	175	236	8	C
ATOM	216	CE1	TYR	27	6.302	5.236	18.130	1.00	6.91		C
ANISOU	216	CE1	TYR	27	936	887	801	184	142	75	C
ATOM	217	CD2	TYR	27	7.563	3.361	16.589	1.00	5.50		C
ANISOU	217	CD2	TYR	27	691	770	629	42	137	-33	C
ATOM	218	CE2	TYR	27	7.340	4.648	16.097	1.00	7.02		C
ANISOU	218	CE2	TYR	27	956	917	793	63	234	176	C
ATOM	219	CZ	TYR	27	6.715	5.588	16.874	1.00	6.87		C
ANISOU	219	CZ	TYR	27	920	810	882	123	15	162	C
ATOM	220	OH	TYR	27	6.552	6.770	16.317	1.00	9.92		O
ANISOU	220	OH	TYR	27	1550	969	1251	120	257	351	O
ATOM	221	C	TYR	27	7.825	-0.011	20.206	1.00	4.94		C
ANISOU	221	C	TYR	27	539	757	581	-22	76	11	C
ATOM	222	O	TYR	27	6.837	-0.560	20.676	1.00	5.15		O
ANISOU	222	O	TYR	27	512	769	677	-37	127	34	O
ATOM	223	N	SER	28	8.966	-0.655	19.987	1.00	4.72		N
ANISOU	223	N	SER	28	481	704	610	-12	147	-1	N
ATOM	224	CA	SER	28	9.128	-2.036	20.357	1.00	4.61		C
ANISOU	224	CA	SER	28	568	649	535	-19	52	13	C
ATOM	225	CB	SER	28	10.456	-2.560	19.878	1.00	5.11		C
ANISOU	225	CB	SER	28	634	697	609	-19	110	-3	C
ATOM	226	OG	SER	28	10.604	-2.492	18.499	1.00	5.34		O
ANISOU	226	OG	SER	28	653	783	592	-40	96	-75	O
ATOM	227	C	SER	28	9.001	-2.230	21.889	1.00	4.85		C
ANISOU	227	C	SER	28	526	702	616	3	79	8	C
ATOM	228	O	SER	28	8.348	-3.171	22.349	1.00	5.07		O
ANISOU	228	O	SER	28	619	678	630	-3	162	22	O
ATOM	229	N	GLU	29	9.599	-1.318	22.651	1.00	4.68		N
ANISOU	229	N	GLU	29	554	678	544	-32	86	9	N
ATOM	230	CA	GLU	29	9.472	-1.364	24.092	1.00	5.17		C
ANISOU	230	CA	GLU	29	575	802	586	23	105	1	C
ATOM	231	CB	GLU	29	10.288	-0.241	24.728	1.00	5.64		C
ANISOU	231	CB	GLU	29	616	918	609	-34	3	-34	C
ATOM	232	CG	GLU	29	11.781	-0.396	24.584	1.00	6.08		C
ANISOU	232	CG	GLU	29	605	945	758	53	-13	-7	C
ATOM	233	CD	AGLU	29	12.448	0.888	25.055	0.61	5.88		C
ANISOU	233	CD	AGLU	29	596	1021	616	-65	8	113	C
ATOM	234	CD	BGLU	29	12.557	0.891	24.684	0.39	7.38		C
ANISOU	234	CD	BGLU	29	671	1227	906	-183	57	102	C
ATOM	235	OE1	AGLU	29	12.403	1.188	26.255	0.61	8.07		O
ANISOU	235	OE1	AGLU	29	1075	1236	754	-410	96	-24	O
ATOM	236	OE1	BGLU	29	11.981	1.980	24.903	0.39	10.81		O

Forb. Fig. 3C

ISOU	236	OE1BGLU	29	1296	1050	1762	-133	-108	-98	O
ATOM	237	OE2AGLU	29	12.960	1.705	24.256	0.61	9.12		O
ANISOU	237	OE2AGLU	29	1393	1190	884	-317	235	171	O
ATOM	238	OE2BGLU	29	13.757	0.707	24.448	0.39	11.75		O
ANISOU	238	OE2BGLU	29	744	1935	1787	-392	363	-375	O
ATOM	239	C GLU	29	8.009	-1.239	24.519	1.00	4.73		C
ANISOU	239	C GLU	29	529	716	554	-22	82	10	C
ATOM	240	O GLU	29	7.554	-1.877	25.446	1.00	5.37		O
ANISOU	240	O GLU	29	667	813	559	-35	118	4	O
ATOM	241	N ALA	30	7.279	-0.350	23.829	1.00	4.90		N
ANISOU	241	N ALA	30	526	773	564	-27	105	-12	N
ATOM	242	CA ALA	30	5.876	-0.173	24.152	1.00	4.87		C
ANISOU	242	CA ALA	30	533	726	591	20	116	-63	C
ATOM	243	CB ALA	30	5.350	1.051	23.395	1.00	5.57		C
ANISOU	243	CB ALA	30	604	749	764	52	211	1	C
ATOM	244	C ALA	30	5.059	-1.398	23.823	1.00	5.04		C
ANISOU	244	C ALA	30	612	721	581	-30	141	35	C
ATOM	245	O ALA	30	4.158	-1.761	24.585	1.00	5.45		O
ANISOU	245	O ALA	30	564	871	634	-25	202	-39	O
ATOM	246	N ILE	31	5.370	-2.039	22.693	1.00	5.00		N
ANISOU	246	N ILE	31	527	790	583	-58	190	-69	N
ATOM	247	CA ILE	31	4.680	-3.285	22.332	1.00	4.90		C
ANISOU	247	CA ILE	31	474	812	574	-29	103	-49	C
ATOM	248	CB ILE	31	5.083	-3.677	20.900	1.00	5.20		C
ANISOU	248	CB ILE	31	574	832	571	-81	159	-102	C
ATOM	249	CG2 ILE	31	4.611	-5.087	20.560	1.00	6.08		C
ANISOU	249	CG2 ILE	31	890	778	642	-39	173	-74	C
ATOM	250	CG1 ILE	31	4.532	-2.669	19.876	1.00	5.72		C
ANISOU	250	CG1 ILE	31	707	849	618	-89	146	10	C
ATOM	251	CD1 ILE	31	5.149	-2.792	18.496	1.00	6.75		C
ANISOU	251	CD1 ILE	31	898	1086	581	-182	81	7	C
ATOM	252	C ILE	31	4.949	-4.366	23.346	1.00	5.43		C
ANISOU	252	C ILE	31	602	760	702	-44	231	-33	C
ATOM	253	O ILE	31	4.062	-5.149	23.652	1.00	5.86		O
ANISOU	253	O ILE	31	627	865	736	-143	164	40	O
ATOM	254	N LYS	32	6.171	-4.447	23.883	1.00	5.12		N
ANISOU	254	N LYS	32	603	724	618	-28	121	-28	N
ATOM	255	CA LYS	32	6.425	-5.423	24.896	1.00	5.77		C
ANISOU	255	CA LYS	32	714	767	713	-2	165	-65	C
ATOM	256	CB LYS	32	7.868	-5.334	25.410	1.00	5.97		C
ANISOU	256	CB LYS	32	701	729	838	98	96	-43	C
ATOM	257	CG LYS	32	8.203	-6.379	26.482	1.00	7.74		C
ANISOU	257	CG LYS	32	1092	815	1034	123	-11	73	C
ATOM	258	CD LYS	32	9.529	-6.266	27.184	1.00	9.35		C
ANISOU	258	CD LYS	32	1141	1110	1303	184	-145	108	C
ATOM	259	CE LYS	32	10.679	-6.566	26.279	1.00	10.19		C
ANISOU	259	CE LYS	32	1260	1557	1057	23	-60	-56	C
ATOM	260	NZ LYS	32	11.972	-6.401	27.023	1.00	10.88		N
ANISOU	260	NZ LYS	32	1127	1493	1516	160	-92	-150	N
ATOM	261	C LYS	32	5.451	-5.249	26.058	1.00	6.07		C
ANISOU	261	C LYS	32	733	860	714	79	203	83	C
ATOM	262	O LYS	32	4.962	-6.251	26.618	1.00	7.16		O
ANISOU	262	O LYS	32	952	903	866	67	338	140	O
ATOM	263	N LEU	33	5.167	-4.031	26.451	1.00	5.51		N
ANISOU	263	N LEU	33	747	769	577	41	229	27	N
ATOM	264	CA LEU	33	4.197	-3.777	27.510	1.00	5.76		C
ANISOU	264	CA LEU	33	743	896	550	26	201	13	C
ATOM	265	CB LEU	33	4.257	-2.344	27.949	1.00	6.13		C
ANISOU	265	CB LEU	33	791	955	583	5	212	-72	C
ATOM	266	CG LEU	33	5.596	-1.851	28.464	1.00	7.85		C
ANISOU	266	CG LEU	33	1020	1320	642	-317	200	-107	C
ATOM	267	CD1 LEU	33	5.480	-0.402	28.938	1.00	10.91		C
ANISOU	267	CD1 LEU	33	1567	1542	1036	-640	512	-364	C
ATOM	268	CD2 LEU	33	6.133	-2.729	29.580	1.00	10.94		C
ANISOU	268	CD2 LEU	33	1042	2241	874	-589	-141	382	C
ATOM	269	C LEU	33	2.777	-4.112	27.100	1.00	5.96		C
ANISOU	269	C LEU	33	760	900	605	-20	226	-90	C
ATOM	270	O LEU	33	2.021	-4.658	27.890	1.00	7.02		O
ANISOU	270	O LEU	33	922	1138	609	-200	326	-61	O

Forb. Fig. 3c

ATOM	271	N	ASP	34	2.422	-3.713	25.866	1.00	5.98		N
ANISOU	271	N	ASP	34	664	1006	602	-44	246	-17	N
ATOM	272	CA	ASP	34	1.074	-3.865	25.363	1.00	6.35		C
ANISOU	272	CA	ASP	34	699	1069	645	-138	190	-58	C
ATOM	273	CB	ASP	34	0.354	-2.545	25.251	1.00	7.41		C
ANISOU	273	CB	ASP	34	943	1200	674	196	177	-204	C
ATOM	274	CG	ASP	34	-1.089	-2.711	24.867	1.00	10.26		C
ANISOU	274	CG	ASP	34	909	2193	794	344	247	136	C
ATOM	275	OD1	ASP	34	-1.563	-3.867	24.741	1.00	12.29		O
ANISOU	275	OD1	ASP	34	786	2741	1144	-246	60	454	O
ATOM	276	OD2	ASP	34	-1.700	-1.652	24.640	1.00	14.17		O
ANISOU	276	OD2	ASP	34	1400	2925	1058	1181	468	191	O
ATOM	277	C	ASP	34	1.127	-4.560	24.006	1.00	5.94		C
ANISOU	277	C	ASP	34	629	943	686	-35	234	-47	C
ATOM	278	O	ASP	34	1.031	-3.882	22.956	1.00	6.32		O
ANISOU	278	O	ASP	34	799	970	632	-78	217	-11	O
ATOM	279	N	PRO	35	1.265	-5.857	23.985	1.00	6.04		N
ANISOU	279	N	PRO	35	750	897	649	-120	221	-17	N
ATOM	280	CD	PRO	35	1.549	-6.740	25.127	1.00	7.39		C
ANISOU	280	CD	PRO	35	1101	953	755	-62	194	61	C
ATOM	281	CA	PRO	35	1.484	-6.574	22.739	1.00	6.05		C
ANISOU	281	CA	PRO	35	719	845	733	-110	259	-91	C
ATOM	282	CB	PRO	35	1.953	-7.982	23.178	1.00	7.87		C
ANISOU	282	CB	PRO	35	1062	966	961	219	87	-81	C
ATOM	283	CG	PRO	35	1.398	-8.117	24.540	1.00	9.61		C
ANISOU	283	CG	PRO	35	1721	990	940	-130	148	29	C
ATOM	284	C	PRO	35	0.264	-6.658	21.840	1.00	6.57		C
ANISOU	284	C	PRO	35	804	890	804	-81	195	-67	C
ATOM	285	O	PRO	35	0.376	-7.102	20.704	1.00	8.44		O
ANISOU	285	O	PRO	35	1002	1297	909	35	72	-324	O
ATOM	286	N	HIS	36	-0.891	-6.179	22.291	1.00	6.62		N
ANISOU	286	N	HIS	36	655	949	910	-125	197	-86	N
ATOM	287	CA	HIS	36	-2.100	-6.142	21.503	1.00	8.56		C
ANISOU	287	CA	HIS	36	806	1323	1124	-192	20	-27	C
ATOM	288	CB	HIS	36	-3.270	-6.570	22.343	1.00	11.98		C
ANISOU	288	CB	HIS	36	850	1623	2080	-373	378	15	C
ATOM	289	CG	HIS	36	-3.100	-7.952	22.841	1.00	14.81		C
ANISOU	289	CG	HIS	36	1882	1675	2069	-587	663	151	C
ATOM	290	CD2	HIS	36	-3.617	-9.033	22.230	1.00	21.98		C
ANISOU	290	CD2	HIS	36	3333	1701	3317	-1080	-159	458	C
ATOM	291	ND1	HIS	36	-2.466	-8.341	24.007	1.00	16.20		N
ANISOU	291	ND1	HIS	36	2131	1764	2262	-129	772	354	N
ATOM	292	CE1	HIS	36	-2.565	-9.632	24.090	1.00	22.56		C
ANISOU	292	CE1	HIS	36	3847	1874	2849	-627	383	673	C
ATOM	293	NE2	HIS	36	-3.254	-10.065	23.031	1.00	25.67		N
ANISOU	293	NE2	HIS	36	4423	1853	3477	-1440	-117	918	N
ATOM	294	C	HIS	36	-2.322	-4.748	20.896	1.00	8.80		C
ANISOU	294	C	HIS	36	859	1276	1210	74	-39	-62	C
ATOM	295	O	HIS	36	-3.385	-4.533	20.320	1.00	12.29		O
ANISOU	295	O	HIS	36	1046	1737	1886	-26	-125	357	O
ATOM	296	N	ASN	37	-1.394	-3.830	20.999	1.00	8.09		N
ANISOU	296	N	ASN	37	991	1145	937	88	252	76	N
ATOM	297	CA	ASN	37	-1.649	-2.446	20.637	1.00	8.44		C
ANISOU	297	CA	ASN	37	1158	1228	822	304	278	40	C
ATOM	298	CB	ASN	37	-0.695	-1.579	21.441	1.00	8.94		C
ANISOU	298	CB	ASN	37	1503	1122	771	175	179	-31	C
ATOM	299	CG	ASN	37	-1.146	-0.144	21.434	1.00	10.19		C
ANISOU	299	CG	ASN	37	1631	1271	970	289	220	-59	C
ATOM	300	OD1	ASN	37	-1.269	0.488	20.371	1.00	10.39		O
ANISOU	300	OD1	ASN	37	1639	1207	1100	210	313	70	O
ATOM	301	ND2	ASN	37	-1.371	0.421	22.569	1.00	14.07		N
ANISOU	301	ND2	ASN	37	2700	1614	1033	1100	-262	-339	N
ATOM	302	C	ASN	37	-1.489	-2.221	19.144	1.00	6.98		C
ANISOU	302	C	ASN	37	912	941	800	83	153	-61	C
ATOM	303	O	ASN	37	-0.386	-2.112	18.651	1.00	7.50		O
ANISOU	303	O	ASN	37	773	1203	875	101	101	-76	O
ATOM	304	N	HIS	38	-2.621	-2.093	18.465	1.00	7.74		N
ANISOU	304	N	HIS	38	751	1261	929	65	245	65	N
ATOM	305	CA	HIS	38	-2.604	-1.912	17.018	1.00	7.12		C

Forb. Fig. 3c

ANISOU	305	CA	HIS	38	615	1158	930	-39	106	-41	C
ATOM	306	CB	HIS	38	-4.010	-2.086	16.435	1.00	8.62		C
ANISOU	306	CB	HIS	38	650	1248	1379	-130	-104	80	C
ATOM	307	CG	HIS	38	-5.021	-1.301	17.147	1.00	11.88		C
ANISOU	307	CG	HIS	38	605	1704	2204	-190	-24	-336	C
ATOM	308	CD2	HIS	38	-5.632	-0.152	16.847	1.00	13.93		C
ANISOU	308	CD2	HIS	38	923	1739	2629	83	-71	-651	C
ATOM	309	ND1	HIS	38	-5.578	-1.717	18.352	1.00	14.34		N
ANISOU	309	ND1	HIS	38	856	2257	2337	-269	433	-492	N
ATOM	310	CE1	HIS	38	-6.462	-0.834	18.738	1.00	16.81		C
ANISOU	310	CE1	HIS	38	792	2679	2915	-46	289	-457	C
ATOM	311	NE2	HIS	38	-6.522	0.146	17.824	1.00	16.20		N
ANISOU	311	NE2	HIS	38	846	2397	2913	46	169	-606	N
ATOM	312	C	HIS	38	-2.034	-0.567	16.623	1.00	6.76		C
ANISOU	312	C	HIS	38	550	1107	913	14	-17	3	C
ATOM	313	O	HIS	38	-1.412	-0.476	15.555	1.00	6.94		O
ANISOU	313	O	HIS	38	563	1107	967	-114	112	-30	O
ATOM	314	N	VAL	39	-2.256	0.437	17.454	1.00	7.35		N
ANISOU	314	N	VAL	39	535	1229	1029	73	118	-61	N
ATOM	315	CA	VAL	39	-1.666	1.752	17.133	1.00	7.51		C
ANISOU	315	CA	VAL	39	570	1063	1219	103	64	-93	C
ATOM	316	CB	VAL	39	-2.179	2.823	18.097	1.00	10.19		C
ANISOU	316	CB	VAL	39	786	1184	1901	210	272	-318	C
ATOM	317	CG1	VAL	39	-1.412	4.104	17.917	1.00	10.77		C
ANISOU	317	CG1	VAL	39	1111	965	2018	240	78	-176	C
ATOM	318	CG2	VAL	39	-3.649	3.059	17.845	1.00	13.01		C
ANISOU	318	CG2	VAL	39	857	1552	2536	334	23	-557	C
ATOM	319	C	VAL	39	-0.142	1.659	17.091	1.00	6.34		C
ANISOU	319	C	VAL	39	563	879	967	91	82	-63	C
ATOM	320	O	VAL	39	0.507	2.223	16.253	1.00	6.59		O
ANISOU	320	O	VAL	39	644	867	994	68	125	-40	O
ATOM	321	N	LEU	40	0.429	0.976	18.091	1.00	6.64		N
ANISOU	321	N	LEU	40	521	1045	958	114	76	-58	N
ATOM	322	CA	LEU	40	1.880	0.842	18.136	1.00	6.56		C
ANISOU	322	CA	LEU	40	581	1058	853	71	85	-147	C
ATOM	323	CB	LEU	40	2.322	0.142	19.374	1.00	7.42		C
ANISOU	323	CB	LEU	40	724	1341	756	205	66	-131	C
ATOM	324	CG	LEU	40	2.177	0.943	20.652	1.00	15.69		C
ANISOU	324	CG	LEU	40	2033	2959	971	1574	-407	-809	C
ATOM	325	CD1	LEU	40	2.408	-0.004	21.807	1.00	15.48		C
ANISOU	325	CD1	LEU	40	1290	3848	745	1153	-99	-431	C
ATOM	326	CD2	LEU	40	3.190	2.089	20.596	1.00	22.04		C
ANISOU	326	CD2	LEU	40	4821	1492	2062	1140	-2148	-889	C
ATOM	327	C	LEU	40	2.381	0.099	16.911	1.00	5.83		C
ANISOU	327	C	LEU	40	532	942	740	-34	8	-125	C
ATOM	328	O	LEU	40	3.407	0.464	16.343	1.00	5.91		O
ANISOU	328	O	LEU	40	511	903	830	-84	96	-45	O
ATOM	329	N	TYR	41	1.717	-0.981	16.518	1.00	5.74		N
ANISOU	329	N	TYR	41	565	866	748	-40	169	18	N
ATOM	330	CA	TYR	41	2.168	-1.708	15.319	1.00	5.23		C
ANISOU	330	CA	TYR	41	512	771	704	-86	93	14	C
ATOM	331	CB	TYR	41	1.429	-3.013	15.152	1.00	5.71		C
ANISOU	331	CB	TYR	41	610	779	781	-67	17	-6	C
ATOM	332	CG	TYR	41	2.066	-4.127	15.954	1.00	5.71		C
ANISOU	332	CG	TYR	41	609	796	766	-99	1	-66	C
ATOM	333	CD1	TYR	41	3.253	-4.681	15.447	1.00	6.62		C
ANISOU	333	CD1	TYR	41	739	933	843	-10	80	20	C
ATOM	334	CE1	TYR	41	3.898	-5.692	16.114	1.00	6.70		C
ANISOU	334	CE1	TYR	41	624	955	968	12	198	8	C
ATOM	335	CD2	TYR	41	1.592	-4.608	17.138	1.00	6.25		C
ANISOU	335	CD2	TYR	41	659	881	837	-114	137	6	C
ATOM	336	CE2	TYR	41	2.226	-5.625	17.824	1.00	6.10		C
ANISOU	336	CE2	TYR	41	735	900	682	-48	114	-28	C
ATOM	337	CZ	TYR	41	3.374	-6.165	17.292	1.00	6.19		C
ANISOU	337	CZ	TYR	41	669	921	763	-9	56	-61	C
ATOM	338	OH	TYR	41	4.028	-7.205	17.912	1.00	7.53		O
ANISOU	338	OH	TYR	41	980	1036	845	188	24	65	O
ATOM	339	C	TYR	41	2.008	-0.830	14.073	1.00	5.35		C
ANISOU	339	C	TYR	41	536	741	756	-63	50	5	C

Forb. Fig. 3c

ATOM	340	O	TYR	41	2.857	-0.897	13.180	1.00	5.70		O
ANISOU	340	O	TYR	41	639	741	787	-87	123	3	O
ATOM	341	N	SER	42	0.940	-0.025	13.989	1.00	5.66		N
ANISOU	341	N	SER	42	564	841	747	-46	99	38	N
ATOM	342	CA	SER	42	0.819	0.839	12.835	1.00	6.08		C
ANISOU	342	CA	SER	42	597	932	780	-62	-16	95	C
ATOM	343	CB	SER	42	-0.572	1.520	12.907	1.00	7.03		C
ANISOU	343	CB	SER	42	526	1156	991	-36	85	187	C
ATOM	344	OG	SER	42	-0.666	2.467	11.893	1.00	9.01		O
ANISOU	344	OG	SER	42	932	1438	1053	316	-30	166	O
ATOM	345	C	SER	42	1.914	1.892	12.809	1.00	5.63		C
ANISOU	345	C	SER	42	534	807	797	43	54	-28	C
ATOM	346	O	SER	42	2.497	2.187	11.780	1.00	6.48		O
ANISOU	346	O	SER	42	623	962	876	-23	98	108	O
ATOM	347	N	ASN	43	2.234	2.480	13.982	1.00	5.71		N
ANISOU	347	N	ASN	43	535	739	895	56	132	28	N
ATOM	348	CA	ASN	43	3.315	3.447	14.071	1.00	6.00		C
ANISOU	348	CA	ASN	43	628	715	935	54	95	-24	C
ATOM	349	CB	ASN	43	3.435	4.007	15.466	1.00	6.84		C
ANISOU	349	CB	ASN	43	680	870	1048	-47	197	-194	C
ATOM	350	CG	ASN	43	2.445	5.062	15.796	1.00	8.36		C
ANISOU	350	CG	ASN	43	851	1048	1276	101	336	-130	C
ATOM	351	OD1	ASN	43	1.488	5.295	15.069	1.00	10.48		O
ANISOU	351	OD1	ASN	43	1019	1106	1856	269	132	-153	O
ATOM	352	ND2	ASN	43	2.680	5.697	16.937	1.00	14.53		N
ANISOU	352	ND2	ASN	43	2099	1985	1437	958	97	-564	N
ATOM	353	C	ASN	43	4.623	2.797	13.707	1.00	5.48		C
ANISOU	353	C	ASN	43	595	690	796	19	67	-86	C
ATOM	354	O	ASN	43	5.456	3.398	12.999	1.00	5.89		O
ANISOU	354	O	ASN	43	603	678	956	-70	116	26	O
ATOM	355	N	ARG	44	4.874	1.604	14.210	1.00	5.18		N
ANISOU	355	N	ARG	44	467	723	777	-24	113	3	N
ATOM	356	CA	ARG	44	6.144	0.941	13.959	1.00	4.98		C
ANISOU	356	CA	ARG	44	505	663	724	-17	10	-13	C
ATOM	357	CB	ARG	44	6.355	-0.227	14.907	1.00	4.91		C
ANISOU	357	CB	ARG	44	519	642	704	-1	92	6	C
ATOM	358	CG	ARG	44	7.825	-0.622	14.952	1.00	4.86		C
ANISOU	358	CG	ARG	44	515	680	652	-22	68	19	C
ATOM	359	CD	ARG	44	8.176	-1.722	15.925	1.00	5.08		C
ANISOU	359	CD	ARG	44	539	714	679	-59	56	25	C
ATOM	360	NE	ARG	44	7.618	-2.966	15.500	1.00	5.11		N
ANISOU	360	NE	ARG	44	620	652	671	-60	7	-21	N
ATOM	361	CZ	ARG	44	7.994	-4.153	16.000	1.00	5.33		C
ANISOU	361	CZ	ARG	44	622	736	666	-29	25	-8	C
ATOM	362	NH1	ARG	44	8.785	-4.284	16.951	1.00	6.46		N
ANISOU	362	NH1	ARG	44	976	818	662	-76	4	130	N
ATOM	363	NH2	ARG	44	7.475	-5.267	15.451	1.00	6.53		N
ANISOU	363	NH2	ARG	44	834	695	951	-153	-131	64	N
ATOM	364	C	ARG	44	6.236	0.581	12.477	1.00	4.92		C
ANISOU	364	C	ARG	44	471	724	674	-7	68	76	C
ATOM	365	O	ARG	44	7.292	0.736	11.872	1.00	5.22		O
ANISOU	365	O	ARG	44	452	774	757	-12	112	90	O
ATOM	366	N	SER	45	5.126	0.136	11.867	1.00	5.06		N
ANISOU	366	N	SER	45	474	722	727	-54	76	-39	N
ATOM	367	CA	SER	45	5.132	-0.144	10.474	1.00	4.99		C
ANISOU	367	CA	SER	45	537	689	671	-53	54	-20	C
ATOM	368	CB	SER	45	3.729	-0.597	10.030	1.00	4.96		C
ANISOU	368	CB	SER	45	492	721	672	-67	93	17	C
ATOM	369	OG	SER	45	3.685	-0.848	8.638	1.00	5.25		O
ANISOU	369	OG	SER	45	554	730	710	0	39	-28	O
ATOM	370	C	SER	45	5.525	1.081	9.670	1.00	5.05		C
ANISOU	370	C	SER	45	465	741	714	-29	17	51	C
ATOM	371	O	SER	45	6.357	1.026	8.749	1.00	5.84		O
ANISOU	371	O	SER	45	508	915	796	-103	120	29	O
ATOM	372	N	ALA	46	4.899	2.222	9.971	1.00	5.65		N
ANISOU	372	N	ALA	46	470	738	940	-4	109	110	N
ATOM	373	CA	ALA	46	5.207	3.456	9.290	1.00	6.16		C
ANISOU	373	CA	ALA	46	488	807	1045	-58	86	224	C
ATOM	374	CB	ALA	46	4.317	4.580	9.819	1.00	8.66		C

Forb. Fig. 3c

ANISOU	374	CB	ALA	46	629	858	1802	93	272	328	C
ATOM	375	C	ALA	46	6.678	3.838	9.446	1.00	5.65		C
ANISOU	375	C	ALA	46	543	667	938	62	145	108	C
ATOM	376	O	ALA	46	7.292	4.331	8.530	1.00	6.06		O
ANISOU	376	O	ALA	46	653	754	896	-61	105	136	O
ATOM	377	N	ALA	47	7.216	3.644	10.648	1.00	5.62		N
ANISOU	377	N	ALA	47	564	700	872	-25	143	44	N
ATOM	378	CA	ALA	47	8.614	3.979	10.896	1.00	5.52		C
ANISOU	378	CA	ALA	47	577	658	863	-125	122	-15	C
ATOM	379	CB	ALA	47	8.906	3.928	12.386	1.00	6.22		C
ANISOU	379	CB	ALA	47	602	910	851	-56	160	-155	C
ATOM	380	C	ALA	47	9.525	3.072	10.098	1.00	5.25		C
ANISOU	380	C	ALA	47	511	766	720	-61	76	-25	C
ATOM	381	O	ALA	47	10.511	3.528	9.513	1.00	5.65		O
ANISOU	381	O	ALA	47	572	824	751	-185	118	-17	O
ATOM	382	N	TYR	48	9.248	1.763	10.052	1.00	5.03		N
ANISOU	382	N	TYR	48	468	741	701	-67	143	17	N
ATOM	383	CA	TYR	48	10.037	0.883	9.218	1.00	4.96		C
ANISOU	383	CA	TYR	48	471	712	701	-13	94	-4	C
ATOM	384	CB	TYR	48	9.569	-0.537	9.307	1.00	5.04		C
ANISOU	384	CB	TYR	48	484	710	721	-78	103	-28	C
ATOM	385	CG	TYR	48	9.979	-1.333	10.524	1.00	5.06		C
ANISOU	385	CG	TYR	48	581	663	679	-15	28	-52	C
ATOM	386	CD1	TYR	48	11.301	-1.513	10.892	1.00	5.68		C
ANISOU	386	CD1	TYR	48	569	782	806	-33	38	-64	C
ATOM	387	CE1	TYR	48	11.650	-2.288	11.992	1.00	6.32		C
ANISOU	387	CE1	TYR	48	684	875	842	-48	-58	35	C
ATOM	388	CD2	TYR	48	9.012	-2.013	11.290	1.00	5.45		C
ANISOU	388	CD2	TYR	48	578	781	711	-121	113	-46	C
ATOM	389	CE2	TYR	48	9.384	-2.797	12.364	1.00	6.22		C
ANISOU	389	CE2	TYR	48	842	793	727	-136	133	60	C
ATOM	390	CZ	TYR	48	10.701	-2.928	12.720	1.00	6.57		C
ANISOU	390	CZ	TYR	48	925	768	804	-191	-74	66	C
ATOM	391	OH	TYR	48	11.012	-3.737	13.782	1.00	9.48		O
ANISOU	391	OH	TYR	48	1371	1256	976	-414	-403	286	O
ATOM	392	C	TYR	48	9.986	1.352	7.768	1.00	5.15		C
ANISOU	392	C	TYR	48	552	673	733	-57	160	-55	C
ATOM	393	O	TYR	48	10.983	1.322	7.079	1.00	5.78		O
ANISOU	393	O	TYR	48	630	806	760	-130	222	-1	O
ATOM	394	N	ALA	49	8.795	1.728	7.290	1.00	5.42		N
ANISOU	394	N	ALA	49	587	825	649	-133	33	19	N
ATOM	395	CA	ALA	49	8.676	2.183	5.899	1.00	6.15		C
ANISOU	395	CA	ALA	49	813	870	654	-166	98	62	C
ATOM	396	CB	ALA	49	7.209	2.355	5.533	1.00	7.14		C
ANISOU	396	CB	ALA	49	787	1073	853	-198	-65	127	C
ATOM	397	C	ALA	49	9.476	3.445	5.679	1.00	6.48		C
ANISOU	397	C	ALA	49	780	908	773	-153	95	5	C
ATOM	398	O	ALA	49	10.114	3.585	4.626	1.00	7.04		O
ANISOU	398	O	ALA	49	936	927	811	-229	194	41	O
ATOM	399	N	LYS	50	9.468	4.359	6.631	1.00	5.94		N
ANISOU	399	N	LYS	50	736	727	795	-127	124	26	N
ATOM	400	CA	LYS	50	10.201	5.599	6.485	1.00	6.27		C
ANISOU	400	CA	LYS	50	789	741	853	-159	138	51	C
ATOM	401	CB	LYS	50	9.852	6.538	7.619	1.00	6.65		C
ANISOU	401	CB	LYS	50	833	757	934	-5	120	-38	C
ATOM	402	CG	LYS	50	10.374	7.959	7.408	1.00	7.84		C
ANISOU	402	CG	LYS	50	1032	809	1137	-92	143	10	C
ATOM	403	CD	LYS	50	9.977	8.875	8.518	1.00	8.91		C
ANISOU	403	CD	LYS	50	1167	891	1326	5	44	-202	C
ATOM	404	CE	LYS	50	10.240	10.322	8.141	1.00	10.44		C
ANISOU	404	CE	LYS	50	1689	968	1310	-147	33	-97	C
ATOM	405	NZ	LYS	50	9.857	11.244	9.261	1.00	14.31		N
ANISOU	405	NZ	LYS	50	2612	1039	1786	293	-355	-406	N
ATOM	406	C	LYS	50	11.688	5.337	6.430	1.00	6.11		C
ANISOU	406	C	LYS	50	770	789	762	-160	147	5	C
ATOM	407	O	LYS	50	12.406	5.963	5.642	1.00	7.05		O
ANISOU	407	O	LYS	50	845	888	948	-222	213	100	O
ATOM	408	N	LYS	51	12.158	4.410	7.258	1.00	5.95		N
ANISOU	408	N	LYS	51	657	838	764	-151	145	6	N

Forb. Fig. 3c

ATOM	409	CA	LYS	51	13.569	4.061	7.232	1.00	6.19		C
ANISOU	409	CA	LYS	51	644	892	817	-75	79	-65	C
ATOM	410	CB	LYS	51	13.802	3.090	8.430	1.00	6.78		C
ANISOU	410	CB	LYS	51	665	1109	801	-75	226	9	C
ATOM	411	CG	LYS	51	15.181	2.499	8.437	1.00	6.52		C
ANISOU	411	CG	LYS	51	618	1014	845	-146	221	-57	C
ATOM	412	CD	LYS	51	15.437	1.687	9.680	1.00	7.12		C
ANISOU	412	CD	LYS	51	924	938	843	5	164	-124	C
ATOM	413	CE	LYS	51	16.791	1.036	9.601	1.00	7.55		C
ANISOU	413	CE	LYS	51	858	1051	959	-37	348	-295	C
ATOM	414	NZ	LYS	51	17.097	0.318	10.822	1.00	8.55		N
ANISOU	414	NZ	LYS	51	788	882	1580	202	442	146	N
ATOM	415	C	LYS	51	13.949	3.375	5.924	1.00	5.80		C
ANISOU	415	C	LYS	51	677	729	798	-112	163	-28	C
ATOM	416	O	LYS	51	15.031	3.548	5.390	1.00	6.20		O
ANISOU	416	O	LYS	51	665	912	778	-144	187	35	O
ATOM	417	N	GLY	52	13.038	2.521	5.461	1.00	6.37		N
ANISOU	417	N	GLY	52	630	934	857	-212	256	-153	N
ATOM	418	CA	GLY	52	13.225	1.716	4.302	1.00	6.03		C
ANISOU	418	CA	GLY	52	617	949	726	-148	200	-83	C
ATOM	419	C	GLY	52	13.488	0.244	4.576	1.00	5.90		C
ANISOU	419	C	GLY	52	538	939	763	-218	141	-59	C
ATOM	420	O	GLY	52	14.246	-0.386	3.800	1.00	6.64		O
ANISOU	420	O	GLY	52	722	959	843	-122	303	-82	O
ATOM	421	N	ASP	53	12.854	-0.343	5.590	1.00	6.02		N
ANISOU	421	N	ASP	53	529	1072	685	-150	148	46	N
ATOM	422	CA	ASP	53	12.806	-1.767	5.764	1.00	6.44		C
ANISOU	422	CA	ASP	53	524	1054	869	-154	128	130	C
ATOM	423	CB	ASP	53	13.274	-2.249	7.117	1.00	8.61		C
ANISOU	423	CB	ASP	53	618	1465	1189	-291	-114	447	C
ATOM	424	CG	ASP	53	13.437	-3.840	7.101	1.00	8.71		C
ANISOU	424	CG	ASP	53	687	1414	1210	-1	94	334	C
ATOM	425	OD1	ASP	53	12.657	-4.500	6.465	1.00	9.35		O
ANISOU	425	OD1	ASP	53	656	1270	1627	-74	126	306	O
ATOM	426	OD2	ASP	53	14.411	-4.314	7.742	1.00	10.62		O
ANISOU	426	OD2	ASP	53	958	1545	1531	70	-9	347	O
ATOM	427	C	ASP	53	11.369	-2.192	5.486	1.00	5.88		C
ANISOU	427	C	ASP	53	568	864	802	-81	106	99	C
ATOM	428	O	ASP	53	10.519	-2.248	6.348	1.00	5.77		O
ANISOU	428	O	ASP	53	489	967	737	-132	127	-6	O
ATOM	429	N	TYR	54	11.095	-2.371	4.200	1.00	6.18		N
ANISOU	429	N	TYR	54	488	1065	797	-96	185	47	N
ATOM	430	CA	TYR	54	9.721	-2.592	3.787	1.00	5.84		C
ANISOU	430	CA	TYR	54	519	924	775	-50	109	59	C
ATOM	431	CB	TYR	54	9.594	-2.352	2.295	1.00	6.33		C
ANISOU	431	CB	TYR	54	754	939	714	-116	117	-35	C
ATOM	432	CG	TYR	54	10.010	-0.986	1.863	1.00	6.29		C
ANISOU	432	CG	TYR	54	663	963	764	-57	54	83	C
ATOM	433	CD1	TYR	54	9.511	0.152	2.468	1.00	7.27		C
ANISOU	433	CD1	TYR	54	972	1015	776	-154	184	-93	C
ATOM	434	CE1	TYR	54	9.912	1.410	2.077	1.00	7.85		C
ANISOU	434	CE1	TYR	54	1103	942	938	-160	72	44	C
ATOM	435	CD2	TYR	54	10.929	-0.838	0.828	1.00	7.23		C
ANISOU	435	CD2	TYR	54	681	1091	975	-10	185	129	C
ATOM	436	CE2	TYR	54	11.305	0.427	0.420	1.00	8.18		C
ANISOU	436	CE2	TYR	54	839	1197	1070	-165	187	154	C
ATOM	437	CZ	TYR	54	10.791	1.522	1.036	1.00	7.72		C
ANISOU	437	CZ	TYR	54	977	1024	933	-275	53	107	C
ATOM	438	OH	TYR	54	11.219	2.772	0.589	1.00	10.94		O
ANISOU	438	OH	TYR	54	1704	1095	1357	-447	312	175	O
ATOM	439	C	TYR	54	9.201	-3.945	4.212	1.00	5.33		C
ANISOU	439	C	TYR	54	494	838	694	-45	173	-42	C
ATOM	440	O	TYR	54	8.017	-4.096	4.450	1.00	5.57		O
ANISOU	440	O	TYR	54	541	824	749	-16	169	-27	O
ATOM	441	N	GLN	55	10.099	-4.927	4.343	1.00	5.91		N
ANISOU	441	N	GLN	55	570	976	700	83	151	4	N
ATOM	442	CA	GLN	55	9.669	-6.233	4.837	1.00	5.93		C
ANISOU	442	CA	GLN	55	600	909	746	19	172	-72	C
ATOM	443	CB	GLN	55	10.862	-7.188	4.807	1.00	7.08		C

Form. Fig. 3c

ANISOU	443	CB	GLN	55	661	1027	1002	159	275	-29	C
ATOM	444	CG	GLN	55	10.585	-8.497	5.481	1.00	8.49		C
ANISOU	444	CG	GLN	55	862	1008	1356	277	64	-89	C
ATOM	445	CD	GLN	55	9.406	-9.297	5.022	1.00	8.96		C
ANISOU	445	CD	GLN	55	1197	953	1254	190	173	-144	C
ATOM	446	OE1	GLN	55	9.060	-9.268	3.894	1.00	9.26		O
ANISOU	446	OE1	GLN	55	1282	1019	1218	42	117	-177	O
ATOM	447	NE2	GLN	55	8.772	-10.057	5.932	1.00	9.61		N
ANISOU	447	NE2	GLN	55	1229	1235	1189	132	213	-9	N
ATOM	448	C	GLN	55	9.146	-6.100	6.280	1.00	5.40		C
ANISOU	448	C	GLN	55	537	705	808	51	139	-27	C
ATOM	449	O	GLN	55	8.100	-6.658	6.583	1.00	5.71		O
ANISOU	449	O	GLN	55	559	754	858	16	142	-64	O
ATOM	450	N	LYS	56	9.876	-5.377	7.135	1.00	5.72		N
ANISOU	450	N	LYS	56	485	871	818	-83	79	-16	N
ATOM	451	CA	LYS	56	9.389	-5.229	8.478	1.00	5.55		C
ANISOU	451	CA	LYS	56	521	761	828	-10	21	-8	C
ATOM	452	CB	LYS	56	10.508	-4.720	9.387	1.00	6.29		C
ANISOU	452	CB	LYS	56	566	991	831	39	-68	21	C
ATOM	453	CG	LYS	56	11.574	-5.813	9.544	1.00	7.69		C
ANISOU	453	CG	LYS	56	819	1054	1049	40	-129	124	C
ATOM	454	CD	LYS	56	12.645	-5.407	10.477	1.00	9.36		C
ANISOU	454	CD	LYS	56	803	1306	1447	99	-330	-15	C
ATOM	455	CE	ALYS	56	13.766	-6.431	10.539	0.83	9.94		C
ANISOU	455	CE	ALYS	56	870	1443	1464	126	22	249	C
ATOM	456	CE	BLYS	56	13.975	-6.103	10.222	0.17	8.42		C
ANISOU	456	CE	BLYS	56	861	711	1627	-66	-312	-198	C
ATOM	457	NZ	ALYS	56	14.418	-6.658	9.194	0.83	12.85		N
ANISOU	457	NZ	ALYS	56	1124	2071	1687	117	449	339	N
ATOM	458	NZ	BLYS	56	13.643	-7.547	10.230	0.17	8.44		N
ANISOU	458	NZ	BLYS	56	661	940	1604	-538	571	-556	N
ATOM	459	C	LYS	56	8.141	-4.347	8.539	1.00	4.91		C
ANISOU	459	C	LYS	56	541	668	655	-30	63	-21	C
ATOM	460	O	LYS	56	7.261	-4.588	9.340	1.00	5.57		O
ANISOU	460	O	LYS	56	547	824	747	-109	109	2	O
ATOM	461	N	ALA	57	8.083	-3.345	7.673	1.00	5.04		N
ANISOU	461	N	ALA	57	458	736	721	-57	107	24	N
ATOM	462	CA	ALA	57	6.859	-2.544	7.585	1.00	4.99		C
ANISOU	462	CA	ALA	57	407	747	741	-59	94	-27	C
ATOM	463	CB	ALA	57	7.013	-1.444	6.547	1.00	4.98		C
ANISOU	463	CB	ALA	57	462	659	773	-68	131	-3	C
ATOM	464	C	ALA	57	5.682	-3.445	7.243	1.00	4.63		C
ANISOU	464	C	ALA	57	476	669	614	17	78	7	C
ATOM	465	O	ALA	57	4.584	-3.310	7.814	1.00	4.92		O
ANISOU	465	O	ALA	57	467	674	729	-71	164	-9	O
ATOM	466	N	TYR	58	5.891	-4.359	6.319	1.00	4.73		N
ANISOU	466	N	TYR	58	495	721	580	-91	115	-53	N
ATOM	467	CA	TYR	58	4.856	-5.300	5.908	1.00	4.69		C
ANISOU	467	CA	TYR	58	455	737	590	-81	96	-12	C
ATOM	468	CB	TYR	58	5.352	-6.124	4.711	1.00	5.15		C
ANISOU	468	CB	TYR	58	497	724	737	-96	110	-73	C
ATOM	469	CG	TYR	58	4.417	-7.233	4.341	1.00	4.65		C
ANISOU	469	CG	TYR	58	513	656	596	3	82	-66	C
ATOM	470	CD1	TYR	58	3.123	-6.989	3.926	1.00	5.04		C
ANISOU	470	CD1	TYR	58	598	686	630	-19	83	37	C
ATOM	471	CE1	TYR	58	2.286	-8.005	3.576	1.00	4.85		C
ANISOU	471	CE1	TYR	58	562	606	675	48	57	-6	C
ATOM	472	CD2	TYR	58	4.846	-8.547	4.368	1.00	5.72		C
ANISOU	472	CD2	TYR	58	531	705	937	135	49	-42	C
ATOM	473	CE2	TYR	58	3.999	-9.561	4.041	1.00	6.46		C
ANISOU	473	CE2	TYR	58	714	638	1101	34	67	-64	C
ATOM	474	CZ	TYR	58	2.720	-9.320	3.643	1.00	5.26		C
ANISOU	474	CZ	TYR	58	657	607	734	-47	185	7	C
ATOM	475	OH	TYR	58	1.828	-10.283	3.282	1.00	6.33		O
ANISOU	475	OH	TYR	58	662	641	1102	-81	128	-39	O
ATOM	476	C	TYR	58	4.423	-6.194	7.049	1.00	4.92		C
ANISOU	476	C	TYR	58	567	692	612	-113	87	-65	C
ATOM	477	O	TYR	58	3.242	-6.371	7.290	1.00	5.00		O
ANISOU	477	O	TYR	58	462	767	671	-117	131	-68	O

Forb. Fig. 3c

ATOM	478	N	GLU	59	5.398	-6.758	7.758	1.00	5.16		N
ANISOU	478	N	GLU	59	506	738	716	-41	90	0	N
ATOM	479	CA	GLU	59	5.067	-7.646	8.868	1.00	5.03		C
ANISOU	479	CA	GLU	59	554	620	738	-41	89	-19	C
ATOM	480	CB	GLU	59	6.331	-8.154	9.504	1.00	8.23		C
ANISOU	480	CB	GLU	59	773	1230	1124	363	301	353	C
ATOM	481	CG	GLU	59	7.249	-9.026	8.745	1.00	10.57		C
ANISOU	481	CG	GLU	59	1203	1459	1355	665	506	432	C
ATOM	482	CD	GLU	59	8.689	-9.074	9.362	1.00	13.96		C
ANISOU	482	CD	GLU	59	1344	2673	1287	906	-26	239	C
ATOM	483	OE1	GLU	59	8.956	-8.390	10.413	1.00	17.52		O
ANISOU	483	OE1	GLU	59	1670	3338	1648	642	-136	0	O
ATOM	484	OE2	GLU	59	9.464	-9.733	8.743	1.00	17.22		O
ANISOU	484	OE2	GLU	59	1500	3274	1769	1078	-91	121	O
ATOM	485	C	GLU	59	4.213	-6.913	9.905	1.00	5.05		C
ANISOU	485	C	GLU	59	525	674	718	-45	52	62	C
ATOM	486	O	GLU	59	3.250	-7.444	10.410	1.00	5.35		O
ANISOU	486	O	GLU	59	617	713	702	-105	89	-22	O
ATOM	487	N	ASP	60	4.584	-5.661	10.241	1.00	4.85		N
ANISOU	487	N	ASP	60	520	673	650	-117	82	-28	N
ATOM	488	CA	ASP	60	3.825	-4.933	11.219	1.00	4.75		C
ANISOU	488	CA	ASP	60	484	745	578	-91	82	-24	C
ATOM	489	CB	ASP	60	4.575	-3.712	11.675	1.00	4.93		C
ANISOU	489	CB	ASP	60	562	685	625	-71	15	25	C
ATOM	490	CG	ASP	60	5.652	-3.978	12.693	1.00	5.63		C
ANISOU	490	CG	ASP	60	669	718	753	-45	-40	-56	C
ATOM	491	OD1	ASP	60	5.869	-5.168	13.072	1.00	6.37		O
ANISOU	491	OD1	ASP	60	750	804	867	-67	-113	23	O
ATOM	492	OD2	ASP	60	6.228	-2.970	13.139	1.00	6.60		O
ANISOU	492	OD2	ASP	60	722	881	903	-168	-147	6	O
ATOM	493	C	ASP	60	2.439	-4.568	10.671	1.00	4.73		C
ANISOU	493	C	ASP	60	503	683	609	-101	38	-75	C
ATOM	494	O	ASP	60	1.484	-4.504	11.434	1.00	5.07		O
ANISOU	494	O	ASP	60	532	746	648	-80	113	-23	O
ATOM	495	N	GLY	61	2.337	-4.294	9.378	1.00	4.61		N
ANISOU	495	N	GLY	61	495	649	606	-75	84	22	N
ATOM	496	CA	GLY	61	1.021	-4.090	8.807	1.00	5.08		C
ANISOU	496	CA	GLY	61	557	762	612	-87	76	79	C
ATOM	497	C	GLY	61	0.142	-5.336	8.890	1.00	4.76		C
ANISOU	497	C	GLY	61	486	761	563	-30	29	95	C
ATOM	498	O	GLY	61	-1.028	-5.245	9.208	1.00	5.24		O
ANISOU	498	O	GLY	61	449	840	701	-58	77	56	O
ATOM	499	N	CYS	62	0.740	-6.485	8.621	1.00	4.83		N
ANISOU	499	N	CYS	62	486	671	679	-33	86	-6	N
ATOM	500	CA	CYS	62	0.020	-7.738	8.789	1.00	4.92		C
ANISOU	500	CA	CYS	62	505	708	658	-99	106	-10	C
ATOM	501	CB	CYS	62	0.868	-8.929	8.405	1.00	5.43		C
ANISOU	501	CB	CYS	62	616	684	766	-107	126	-127	C
ATOM	502	SG	CYS	62	1.248	-9.078	6.659	1.00	6.03		S
ANISOU	502	SG	CYS	62	756	802	731	-124	180	-119	S
ATOM	503	C	CYS	62	-0.476	-7.912	10.213	1.00	5.14		C
ANISOU	503	C	CYS	62	514	717	722	-45	98	12	C
ATOM	504	O	CYS	62	-1.604	-8.319	10.459	1.00	5.41		O
ANISOU	504	O	CYS	62	493	839	724	-156	90	0	O
ATOM	505	N	LYS	63	0.394	-7.577	11.202	1.00	5.01		N
ANISOU	505	N	LYS	63	484	819	599	-67	90	58	N
ATOM	506	CA	LYS	63	-0.007	-7.719	12.592	1.00	5.13		C
ANISOU	506	CA	LYS	63	514	819	615	-53	86	22	C
ATOM	507	CB	LYS	63	1.222	-7.451	13.470	1.00	5.84		C
ANISOU	507	CB	LYS	63	549	956	715	23	12	80	C
ATOM	508	CG	LYS	63	0.931	-7.547	14.939	1.00	6.78		C
ANISOU	508	CG	LYS	63	752	1168	655	-47	-7	-56	C
ATOM	509	CD	LYS	63	0.539	-8.917	15.387	1.00	8.17		C
ANISOU	509	CD	LYS	63	1116	1083	907	52	-40	123	C
ATOM	510	CE	LYS	63	0.523	-9.001	16.925	1.00	9.36		C
ANISOU	510	CE	LYS	63	1273	1295	988	-15	14	230	C
ATOM	511	NZ	LYS	63	0.169	-10.398	17.321	1.00	16.90		N
ANISOU	511	NZ	LYS	63	3660	1487	1273	-464	-619	644	N
ATOM	512	C	LYS	63	-1.145	-6.781	12.921	1.00	5.04		C

Forb. Fig. 3c

ANISOU	512	C	LYS	63	520	764	631	-105	93	-16	C
ATOM	513	O	LYS	63	-2.052	-7.132	13.667	1.00	5.75		O
ANISOU	513	O	LYS	63	561	917	706	-58	95	147	O
ATOM	514	N	THR	64	-1.109	-5.561	12.393	1.00	5.25		N
ANISOU	514	N	THR	64	579	808	608	-74	118	3	N
ATOM	515	CA	THR	64	-2.150	-4.599	12.635	1.00	5.53		C
ANISOU	515	CA	THR	64	687	792	621	-57	93	-64	C
ATOM	516	CB	THR	64	-1.815	-3.249	11.975	1.00	5.46		C
ANISOU	516	CB	THR	64	687	742	645	-39	92	-59	C
ATOM	517	OG1	THR	64	-0.519	-2.786	12.415	1.00	6.33		O
ANISOU	517	OG1	THR	64	699	871	833	-80	24	-46	O
ATOM	518	CG2	THR	64	-2.800	-2.198	12.342	1.00	6.19		C
ANISOU	518	CG2	THR	64	736	856	761	79	90	-51	C
ATOM	519	C	THR	64	-3.505	-5.142	12.147	1.00	5.21		C
ANISOU	519	C	THR	64	558	725	699	-6	161	20	C
ATOM	520	O	THR	64	-4.502	-5.049	12.838	1.00	6.08		O
ANISOU	520	O	THR	64	695	890	724	-18	236	49	O
ATOM	521	N	VAL	65	-3.499	-5.662	10.912	1.00	5.27		N
ANISOU	521	N	VAL	65	462	854	686	-22	137	47	N
ATOM	522	CA	VAL	65	-4.701	-6.245	10.337	1.00	5.45		C
ANISOU	522	CA	VAL	65	500	709	861	-2	88	103	C
ATOM	523	CB	VAL	65	-4.420	-6.608	8.859	1.00	5.56		C
ANISOU	523	CB	VAL	65	594	795	725	-48	60	43	C
ATOM	524	CG1	VAL	65	-5.505	-7.472	8.267	1.00	6.64		C
ANISOU	524	CG1	VAL	65	693	848	981	-56	-52	55	C
ATOM	525	CG2	VAL	65	-4.265	-5.317	8.055	1.00	5.87		C
ANISOU	525	CG2	VAL	65	582	877	771	-33	-14	132	C
ATOM	526	C	VAL	65	-5.186	-7.437	11.135	1.00	5.54		C
ANISOU	526	C	VAL	65	574	727	805	36	146	96	C
ATOM	527	O	VAL	65	-6.381	-7.641	11.310	1.00	6.77		O
ANISOU	527	O	VAL	65	507	943	1123	-25	210	185	O
ATOM	528	N	ASP	66	-4.257	-8.249	11.635	1.00	5.59		N
ANISOU	528	N	ASP	66	495	758	872	-6	160	110	N
ATOM	529	CA	ASP	66	-4.634	-9.392	12.477	1.00	6.16		C
ANISOU	529	CA	ASP	66	613	737	989	-107	202	129	C
ATOM	530	CB	AASP	66	-3.446	-10.282	12.755	0.68	7.15		C
ANISOU	530	CB	AASP	66	747	837	1134	29	205	369	C
ATOM	531	CB	BASP	66	-3.390	-10.215	12.823	0.32	7.73		C
ANISOU	531	CB	BASP	66	922	539	1475	104	117	127	C
ATOM	532	CG	AASP	66	-2.856	-11.064	11.601	0.68	9.59		C
ANISOU	532	CG	AASP	66	1046	861	1737	174	410	120	C
ATOM	533	CG	BASP	66	-3.806	-11.579	13.336	0.32	8.83		C
ANISOU	533	CG	BASP	66	1123	732	1501	-114	-244	171	C
ATOM	534	OD1AASP		66	-3.505	-11.265	10.574	0.68	12.80		O
ANISOU	534	OD1AASP		66	2028	1323	1513	473	325	-181	O
ATOM	535	OD1BASP		66	-4.514	-12.257	12.581	0.32	10.08		O
ANISOU	535	OD1BASP		66	990	688	2151	-29	-381	-97	O
ATOM	536	OD2AASP		66	-1.687	-11.515	11.781	0.68	15.71		O
ANISOU	536	OD2AASP		66	1705	2000	2266	1121	554	338	O
ATOM	537	OD2BASP		66	-3.520	-11.916	14.482	0.32	13.01		O
ANISOU	537	OD2BASP		66	1914	1094	1936	-353	-693	683	O
ATOM	538	C	ASP	66	-5.295	-8.918	13.758	1.00	6.39		C
ANISOU	538	C	ASP	66	589	983	856	-41	140	200	C
ATOM	539	O	ASP	66	-6.290	-9.510	14.188	1.00	7.53		O
ANISOU	539	O	ASP	66	734	1014	1114	-191	278	208	O
ATOM	540	N	LEU	67	-4.755	-7.904	14.388	1.00	6.06		N
ANISOU	540	N	LEU	67	595	910	797	-64	139	169	N
ATOM	541	CA	LEU	67	-5.255	-7.410	15.639	1.00	6.50		C
ANISOU	541	CA	LEU	67	636	1060	774	-44	176	164	C
ATOM	542	CB	LEU	67	-4.281	-6.398	16.272	1.00	6.49		C
ANISOU	542	CB	LEU	67	691	927	848	9	94	67	C
ATOM	543	CG	LEU	67	-3.013	-7.002	16.848	1.00	6.99		C
ANISOU	543	CG	LEU	67	767	1079	810	131	24	71	C
ATOM	544	CD1	LEU	67	-2.033	-5.877	17.155	1.00	7.96		C
ANISOU	544	CD1	LEU	67	703	1267	1054	76	51	16	C
ATOM	545	CD2	LEU	67	-3.323	-7.769	18.118	1.00	8.88		C
ANISOU	545	CD2	LEU	67	930	1454	990	67	41	326	C
ATOM	546	C	LEU	67	-6.613	-6.748	15.489	1.00	6.46		C
ANISOU	546	C	LEU	67	625	924	905	-42	201	256	C

Forb. Fig. 3c

ATOM	547	O	LEU	67	-7.489	-6.935	16.335	1.00	8.10		O
ANISOU	547	O	LEU	67	744	1385	950	87	276	318	O
ATOM	548	N	LYS	68	-6.768	-5.955	14.451	1.00	5.80		N
ANISOU	548	N	LYS	68	510	981	713	-30	162	100	N
ATOM	549	CA	LYS	68	-7.929	-5.093	14.254	1.00	6.10		C
ANISOU	549	CA	LYS	68	618	924	775	-3	148	72	C
ATOM	550	CB	LYS	68	-7.656	-3.670	14.632	1.00	7.37		C
ANISOU	550	CB	LYS	68	825	906	1070	-53	100	-8	C
ATOM	551	CG	LYS	68	-7.597	-3.375	16.089	1.00	8.90		C
ANISOU	551	CG	LYS	68	948	1247	1184	-38	-137	-152	C
ATOM	552	CD	LYS	68	-8.913	-3.575	16.805	1.00	10.20		C
ANISOU	552	CD	LYS	68	1140	1626	1108	-9	184	-303	C
ATOM	553	CE	LYS	68	-8.864	-3.243	18.276	1.00	14.12		C
ANISOU	553	CE	LYS	68	1553	2354	1458	-427	194	-700	C
ATOM	554	NZ	LYS	68	-10.158	-3.406	18.940	1.00	18.80		N
ANISOU	554	NZ	LYS	68	1723	4040	1380	-87	437	-982	N
ATOM	555	C	LYS	68	-8.381	-5.247	12.822	1.00	5.81		C
ANISOU	555	C	LYS	68	458	884	865	22	200	39	C
ATOM	556	O	LYS	68	-8.070	-4.400	11.964	1.00	6.07		O
ANISOU	556	O	LYS	68	515	887	905	-32	196	162	O
ATOM	557	N	PRO	69	-9.097	-6.301	12.495	1.00	5.56		N
ANISOU	557	N	PRO	69	537	764	812	56	154	88	N
ATOM	558	CD	PRO	69	-9.471	-7.428	13.390	1.00	6.46		C
ANISOU	558	CD	PRO	69	722	846	887	-30	98	229	C
ATOM	559	CA	PRO	69	-9.472	-6.581	11.114	1.00	5.75		C
ANISOU	559	CA	PRO	69	625	719	840	129	153	6	C
ATOM	560	CB	PRO	69	-10.265	-7.903	11.198	1.00	8.12		C
ANISOU	560	CB	PRO	69	1163	818	1106	-21	-45	37	C
ATOM	561	CG	PRO	69	-9.798	-8.512	12.435	1.00	8.90		C
ANISOU	561	CG	PRO	69	1213	997	1171	-198	184	96	C
ATOM	562	C	PRO	69	-10.302	-5.518	10.454	1.00	5.33		C
ANISOU	562	C	PRO	69	475	759	792	84	175	64	C
ATOM	563	O	PRO	69	-10.393	-5.485	9.219	1.00	6.41		O
ANISOU	563	O	PRO	69	607	1085	744	155	200	31	O
ATOM	564	N	ASP	70	-10.957	-4.655	11.227	1.00	5.23		N
ANISOU	564	N	ASP	70	479	732	775	59	134	18	N
ATOM	565	CA	ASP	70	-11.822	-3.624	10.625	1.00	5.43		C
ANISOU	565	CA	ASP	70	507	737	819	53	148	111	C
ATOM	566	CB	ASP	70	-13.136	-3.541	11.369	1.00	6.31		C
ANISOU	566	CB	ASP	70	493	755	1149	21	220	10	C
ATOM	567	CG	ASP	70	-13.921	-4.809	11.295	1.00	6.29		C
ANISOU	567	CG	ASP	70	601	904	883	7	200	33	C
ATOM	568	OD1	ASP	70	-13.764	-5.556	10.311	1.00	7.81		O
ANISOU	568	OD1	ASP	70	848	1027	1092	-207	300	-107	O
ATOM	569	OD2	ASP	70	-14.710	-5.032	12.194	1.00	7.83		O
ANISOU	569	OD2	ASP	70	954	864	1155	-23	353	150	O
ATOM	570	C	ASP	70	-11.169	-2.270	10.558	1.00	5.81		C
ANISOU	570	C	ASP	70	469	826	913	25	149	97	C
ATOM	571	O	ASP	70	-11.796	-1.327	10.071	1.00	6.64		O
ANISOU	571	O	ASP	70	569	859	1093	64	120	147	O
ATOM	572	N	TRP	71	-9.923	-2.130	11.003	1.00	5.88		N
ANISOU	572	N	TRP	71	454	825	956	10	216	122	N
ATOM	573	CA	TRP	71	-9.278	-0.820	11.054	1.00	5.93		C
ANISOU	573	CA	TRP	71	549	804	899	-27	218	62	C
ATOM	574	CB	ATRP	71	-8.222	-0.783	12.110	0.67	6.03		C
ANISOU	574	CB	ATRP	71	621	882	788	-5	229	14	C
ATOM	575	CB	BTRP	71	-8.391	-0.794	12.281	0.33	5.88		C
ANISOU	575	CB	BTRP	71	406	986	840	98	240	-52	C
ATOM	576	CG	ATRP	71	-7.718	0.590	12.385	0.67	6.24		C
ANISOU	576	CG	ATRP	71	716	854	801	30	139	-21	C
ATOM	577	CG	BTRP	71	-7.828	0.533	12.668	0.33	7.59		C
ANISOU	577	CG	BTRP	71	646	948	1291	76	25	-124	C
ATOM	578	CD2ATRP		71	-6.420	0.903	12.902	0.67	7.62		C
ANISOU	578	CD2ATRP		71	779	1033	1084	-10	-5	53	C
ATOM	579	CD2BTRP		71	-6.477	0.980	12.636	0.33	7.41		C
ANISOU	579	CD2BTRP		71	689	929	1196	13	285	-222	C
ATOM	580	CE2ATRP		71	-6.310	2.294	13.043	0.67	8.74		C
ANISOU	580	CE2ATRP		71	798	1085	1438	100	-15	-358	C
ATOM	581	CE2BTRP		71	-6.433	2.302	13.104	0.33	8.86		C

26/137 Figs. Fig 3c

ANISOU	581	CE2BTRP	71	842	988	1535	109	-102	-347	C
ATOM	582	CE3ATRP	71	-5.312	0.134	13.240	0.67	7.74		C
ANISOU	582	CE3ATRP	71	666	1022	1255	44	186	27	C
ATOM	583	CE3BTRP	71	-5.253	0.414	12.264	0.33	8.17		C
ANISOU	583	CE3BTRP	71	629	1087	1388	115	156	-97	C
ATOM	584	CD1ATRP	71	-8.349	1.781	12.240	0.67	7.74		C
ANISOU	584	CD1ATRP	71	783	883	1274	138	-60	-102	C
ATOM	585	CD1BTRP	71	-8.535	1.591	13.154	0.33	8.68		C
ANISOU	585	CD1BTRP	71	662	1346	1292	189	25	-537	C
ATOM	586	NE1ATRP	71	-7.501	2.798	12.638	0.67	8.97		N
ANISOU	586	NE1ATRP	71	1148	957	1304	113	-329	-265	N
ATOM	587	NE1BTRP	71	-7.708	2.654	13.415	0.33	9.92		N
ANISOU	587	NE1BTRP	71	916	1172	1680	273	-35	-597	N
ATOM	588	CZ2ATRP	71	-5.179	2.968	13.526	0.67	9.92		C
ANISOU	588	CZ2ATRP	71	1018	1087	1666	40	-243	-250	C
ATOM	589	CZ2BTRP	71	-5.312	3.122	13.236	0.33	10.02		C
ANISOU	589	CZ2BTRP	71	982	928	1897	61	-5	-434	C
ATOM	590	CZ3ATRP	71	-4.175	0.767	13.726	0.67	8.86		C
ANISOU	590	CZ3ATRP	71	721	1087	1558	94	-28	-131	C
ATOM	591	CZ3BTRP	71	-4.109	1.194	12.376	0.33	8.28		C
ANISOU	591	CZ3BTRP	71	559	1168	1419	148	50	-294	C
ATOM	592	CH2ATRP	71	-4.123	2.157	13.849	0.67	9.33		C
ANISOU	592	CH2ATRP	71	972	1110	1464	-53	-214	-156	C
ATOM	593	CH2BTRP	71	-4.136	2.505	12.847	0.33	10.73		C
ANISOU	593	CH2BTRP	71	897	1234	1944	119	-104	-440	C
ATOM	594	C TRP	71	-8.629	-0.569	9.696	1.00	5.65		C
ANISOU	594	C TRP	71	550	669	928	54	180	49	C
ATOM	595	O TRP	71	-7.648	-1.209	9.337	1.00	5.83		O
ANISOU	595	O TRP	71	572	782	862	87	211	4	O
ATOM	596	N GLY	72	-9.188	0.355	8.936	1.00	6.33		N
ANISOU	596	N GLY	72	568	840	996	122	205	102	N
ATOM	597	CA GLY	72	-8.716	0.559	7.588	1.00	6.67		C
ANISOU	597	CA GLY	72	669	964	900	151	209	75	C
ATOM	598	C GLY	72	-7.251	0.892	7.503	1.00	6.59		C
ANISOU	598	C GLY	72	745	808	951	109	230	91	C
ATOM	599	O GLY	72	-6.570	0.464	6.580	1.00	6.57		O
ANISOU	599	O GLY	72	790	864	842	191	297	39	O
ATOM	600	N LYS	73	-6.767	1.681	8.447	1.00	6.67		N
ANISOU	600	N LYS	73	728	810	995	-14	413	1	N
ATOM	601	CA LYS	73	-5.360	2.112	8.414	1.00	7.90		C
ANISOU	601	CA LYS	73	855	725	1424	-143	497	-194	C
ATOM	602	CB LYS	73	-5.081	3.014	9.631	1.00	10.98		C
ANISOU	602	CB LYS	73	1080	1034	2057	-166	535	-589	C
ATOM	603	CG LYS	73	-3.710	3.607	9.552	1.00	14.49		C
ANISOU	603	CG LYS	73	1068	1574	2864	-378	421	-916	C
ATOM	604	CD ALYS	73	-3.646	4.668	10.675	0.59	18.41		C
ANISOU	604	CD ALYS	73	1571	2021	3401	-648	687	-1380	C
ATOM	605	CD BLYS	73	-3.272	4.675	10.531	0.41	18.08		C
ANISOU	605	CD BLYS	73	1628	1650	3594	-683	599	-1222	C
ATOM	606	CE ALYS	73	-2.690	5.756	10.228	0.59	21.39		C
ANISOU	606	CE ALYS	73	1963	1975	4188	-905	123	-984	C
ATOM	607	CE BLYS	73	-4.310	5.700	10.892	0.41	19.31		C
ANISOU	607	CE BLYS	73	1841	2097	3400	-414	581	-1390	C
ATOM	608	NZ ALYS	73	-2.719	6.843	11.253	0.59	22.78		N
ANISOU	608	NZ ALYS	73	2370	1825	4460	-435	-627	-949	N
ATOM	609	NZ BLYS	73	-3.865	6.618	11.969	0.41	20.22		N
ANISOU	609	NZ BLYS	73	1870	1373	4439	96	-472	-1328	N
ATOM	610	C LYS	73	-4.422	0.936	8.389	1.00	6.19		C
ANISOU	610	C LYS	73	712	820	819	-112	331	-142	C
ATOM	611	O LYS	73	-3.354	1.021	7.796	1.00	6.54		O
ANISOU	611	O LYS	73	652	875	958	-155	316	-117	O
ATOM	612	N GLY	74	-4.757	-0.162	9.071	1.00	6.15		N
ANISOU	612	N GLY	74	584	926	826	-100	272	-115	N
ATOM	613	CA GLY	74	-3.835	-1.295	9.053	1.00	5.78		C
ANISOU	613	CA GLY	74	520	967	708	-102	124	42	C
ATOM	614	C GLY	74	-3.630	-1.859	7.663	1.00	5.13		C
ANISOU	614	C GLY	74	519	728	701	-8	191	64	C
ATOM	615	O GLY	74	-2.541	-2.260	7.289	1.00	5.19		O
ANISOU	615	O GLY	74	481	818	672	-49	99	88	O

Forb. Fig. 3c

ATOM	616	N	TYR	75	-4.721	-1.911	6.885	1.00	5.07	N
ANISOU	616	N	TYR	75	452	795	677	1	111	N
ATOM	617	CA	TYR	75	-4.595	-2.345	5.506	1.00	5.22	C
ANISOU	617	CA	TYR	75	397	847	741	-20	84	C
ATOM	618	CB	TYR	75	-5.976	-2.484	4.838	1.00	5.51	C
ANISOU	618	CB	TYR	75	469	907	715	69	39	C
ATOM	619	CG	TYR	75	-6.789	-3.581	5.470	1.00	5.03	C
ANISOU	619	CG	TYR	75	484	789	639	50	37	C
ATOM	620	CD1	TYR	75	-6.743	-4.879	5.046	1.00	5.16	C
ANISOU	620	CD1	TYR	75	467	840	652	69	71	C
ATOM	621	CE1	TYR	75	-7.469	-5.864	5.644	1.00	5.70	C
ANISOU	621	CE1	TYR	75	589	858	720	-36	74	C
ATOM	622	CD2	TYR	75	-7.626	-3.280	6.545	1.00	5.51	C
ANISOU	622	CD2	TYR	75	559	831	704	21	100	C
ATOM	623	CE2	TYR	75	-8.368	-4.248	7.173	1.00	5.48	C
ANISOU	623	CE2	TYR	75	504	879	700	-4	144	C
ATOM	624	CZ	TYR	75	-8.298	-5.551	6.699	1.00	5.40	C
ANISOU	624	CZ	TYR	75	544	799	710	43	149	C
ATOM	625	OH	TYR	75	-8.997	-6.538	7.299	1.00	6.04	O
ANISOU	625	OH	TYR	75	630	766	899	-51	194	O
ATOM	626	C	TYR	75	-3.744	-1.384	4.689	1.00	5.30	C
ANISOU	626	C	TYR	75	476	780	758	98	78	C
ATOM	627	O	TYR	75	-3.011	-1.787	3.816	1.00	5.42	O
ANISOU	627	O	TYR	75	505	851	703	67	160	O
ATOM	628	N	SER	76	-3.850	-0.081	4.973	1.00	5.44	N
ANISOU	628	N	SER	76	521	786	761	54	110	N
ATOM	629	CA	SER	76	-2.989	0.867	4.320	1.00	5.82	C
ANISOU	629	CA	SER	76	635	869	705	116	117	C
ATOM	630	CB	ASER	76	-3.383	2.284	4.710	0.69	7.09	C
ANISOU	630	CB	ASER	76	761	758	1173	104	-44	C
ATOM	631	CB	BSER	76	-3.339	2.296	4.733	0.31	6.54	C
ANISOU	631	CB	BSER	76	681	840	964	59	433	C
ATOM	632	OG	ASER	76	-2.509	3.146	4.011	0.69	8.83	O
ANISOU	632	OG	ASER	76	1266	878	1212	121	516	O
ATOM	633	OG	BSER	76	-4.696	2.615	4.459	0.31	9.69	O
ANISOU	633	OG	BSER	76	826	880	1975	108	103	O
ATOM	634	C	SER	76	-1.528	0.594	4.634	1.00	5.28	C
ANISOU	634	C	SER	76	565	687	753	-50	139	C
ATOM	635	O	SER	76	-0.666	0.633	3.741	1.00	5.93	O
ANISOU	635	O	SER	76	629	859	766	-23	247	O
ATOM	636	N	ARG	77	-1.223	0.290	5.884	1.00	5.11	N
ANISOU	636	N	ARG	77	436	822	685	10	112	N
ATOM	637	CA	ARG	77	0.165	-0.016	6.243	1.00	5.06	C
ANISOU	637	CA	ARG	77	449	761	712	-1	100	C
ATOM	638	CB	ARG	77	0.278	-0.219	7.761	1.00	5.55	C
ANISOU	638	CB	ARG	77	615	798	696	0	137	C
ATOM	639	CG	ARG	77	0.021	1.012	8.602	1.00	6.06	C
ANISOU	639	CG	ARG	77	741	827	735	44	51	C
ATOM	640	CD	ARG	77	1.107	2.051	8.455	1.00	6.90	C
ANISOU	640	CD	ARG	77	832	936	853	-8	194	C
ATOM	641	NE	ARG	77	0.934	3.150	9.324	1.00	8.38	N
ANISOU	641	NE	ARG	77	1381	902	902	-151	-72	N
ATOM	642	CZ	ARG	77	0.489	4.308	9.073	1.00	11.59	C
ANISOU	642	CZ	ARG	77	2202	813	1390	33	353	C
ATOM	643	NH1	ARG	77	0.009	4.576	7.872	1.00	20.78	N
ANISOU	643	NH1	ARG	77	4801	1668	1426	1433	251	N
ATOM	644	NH2	ARG	77	0.477	5.177	10.089	1.00	14.42	N
ANISOU	644	NH2	ARG	77	2551	1007	1921	125	651	N
ATOM	645	C	ARG	77	0.649	-1.279	5.534	1.00	4.96	C
ANISOU	645	C	ARG	77	487	742	656	-38	163	C
ATOM	646	O	ARG	77	1.756	-1.310	5.003	1.00	5.26	O
ANISOU	646	O	ARG	77	482	796	719	49	145	O
ATOM	647	N	LYS	78	-0.179	-2.311	5.544	1.00	4.83	N
ANISOU	647	N	LYS	78	469	682	683	36	175	N
ATOM	648	CA	LYS	78	0.189	-3.566	4.935	1.00	4.87	C
ANISOU	648	CA	LYS	78	511	737	601	58	153	C
ATOM	649	CB	LYS	78	-0.900	-4.595	5.269	1.00	4.92	C
ANISOU	649	CB	LYS	78	528	679	663	4	103	C
ATOM	650	CG	LYS	78	-0.618	-5.975	4.686	1.00	5.37	C

Forb. Fig. 3c

ANISOU	650	CG	LYS	78	562	600	877	34	70	48	C
ATOM	651	CD	LYS	78	-1.729	-6.938	5.050	1.00	6.56		C
ANISOU	651	CD	LYS	78	552	770	1171	-71	22	138	C
ATOM	652	CE	LYS	78	-1.598	-8.233	4.243	1.00	9.62		C
ANISOU	652	CE	LYS	78	694	698	2261	-130	-157	-126	C
ATOM	653	NZ	LYS	78	-2.663	-9.200	4.723	1.00	14.09		N
ANISOU	653	NZ	LYS	78	900	779	3674	-243	-55	371	N
ATOM	654	C	LYS	78	0.368	-3.434	3.429	1.00	4.66		C
ANISOU	654	C	LYS	78	503	634	632	46	110	33	C
ATOM	655	O	LYS	78	1.368	-3.872	2.847	1.00	4.84		O
ANISOU	655	O	LYS	78	545	667	628	78	129	15	O
ATOM	656	N	ALA	79	-0.628	-2.825	2.770	1.00	4.86		N
ANISOU	656	N	ALA	79	449	783	613	89	124	26	N
ATOM	657	CA	ALA	79	-0.600	-2.695	1.333	1.00	5.13		C
ANISOU	657	CA	ALA	79	556	798	596	108	108	49	C
ATOM	658	CB	ALA	79	-1.972	-2.225	0.835	1.00	6.23		C
ANISOU	658	CB	ALA	79	635	1064	669	175	72	71	C
ATOM	659	C	ALA	79	0.489	-1.751	0.868	1.00	5.05		C
ANISOU	659	C	ALA	79	568	667	685	112	124	32	C
ATOM	660	O	ALA	79	1.111	-2.006	-0.152	1.00	5.55		O
ANISOU	660	O	ALA	79	584	894	631	104	173	28	O
ATOM	661	N	ALA	80	0.717	-0.661	1.593	1.00	5.16		N
ANISOU	661	N	ALA	80	621	661	680	92	232	24	N
ATOM	662	CA	ALA	80	1.753	0.250	1.177	1.00	5.40		C
ANISOU	662	CA	ALA	80	616	663	773	101	230	53	C
ATOM	663	CB	ALA	80	1.748	1.508	2.015	1.00	6.22		C
ANISOU	663	CB	ALA	80	717	615	1032	41	323	9	C
ATOM	664	C	ALA	80	3.102	-0.434	1.220	1.00	4.99		C
ANISOU	664	C	ALA	80	631	620	645	4	180	15	C
ATOM	665	O	ALA	80	3.967	-0.189	0.393	1.00	5.59		O
ANISOU	665	O	ALA	80	638	777	709	11	222	50	O
ATOM	666	N	ALA	81	3.314	-1.279	2.243	1.00	4.99		N
ANISOU	666	N	ALA	81	541	712	640	70	170	3	N
ATOM	667	CA	ALA	81	4.567	-1.986	2.340	1.00	4.98		C
ANISOU	667	CA	ALA	81	525	732	633	31	109	-23	C
ATOM	668	CB	ALA	81	4.656	-2.689	3.698	1.00	5.57		C
ANISOU	668	CB	ALA	81	694	837	586	77	101	16	C
ATOM	669	C	ALA	81	4.737	-2.993	1.200	1.00	4.73		C
ANISOU	669	C	ALA	81	570	633	595	20	152	70	C
ATOM	670	O	ALA	81	5.815	-3.098	0.631	1.00	5.09		O
ANISOU	670	O	ALA	81	528	724	680	79	186	40	O
ATOM	671	N	LEU	82	3.666	-3.705	0.862	1.00	4.52		N
ANISOU	671	N	LEU	82	481	611	624	-19	192	-22	N
ATOM	672	CA	LEU	82	3.721	-4.583	-0.304	1.00	4.59		C
ANISOU	672	CA	LEU	82	538	630	575	26	126	47	C
ATOM	673	CB	LEU	82	2.391	-5.298	-0.490	1.00	4.88		C
ANISOU	673	CB	LEU	82	597	675	582	-20	131	47	C
ATOM	674	CG	LEU	82	2.153	-6.437	0.506	1.00	4.95		C
ANISOU	674	CG	LEU	82	620	661	601	59	187	98	C
ATOM	675	CD1	LEU	82	0.681	-6.816	0.525	1.00	5.40		C
ANISOU	675	CD1	LEU	82	621	688	744	8	150	4	C
ATOM	676	CD2	LEU	82	3.032	-7.641	0.183	1.00	5.60		C
ANISOU	676	CD2	LEU	82	708	674	747	32	148	-4	C
ATOM	677	C	LEU	82	4.072	-3.809	-1.562	1.00	4.74		C
ANISOU	677	C	LEU	82	540	612	648	-16	148	19	C
ATOM	678	O	LEU	82	4.870	-4.248	-2.367	1.00	5.05		O
ANISOU	678	O	LEU	82	554	727	637	76	201	37	O
ATOM	679	N	GLU	83	3.432	-2.636	-1.735	1.00	4.77		N
ANISOU	679	N	GLU	83	532	644	636	71	192	80	N
ATOM	680	CA	GLU	83	3.722	-1.836	-2.911	1.00	5.15		C
ANISOU	680	CA	GLU	83	575	738	644	67	135	132	C
ATOM	681	CB	GLU	83	2.755	-0.659	-2.944	1.00	5.88		C
ANISOU	681	CB	GLU	83	583	808	842	143	167	255	C
ATOM	682	CG	GLU	83	2.782	0.121	-4.251	1.00	6.75		C
ANISOU	682	CG	GLU	83	642	1013	908	114	226	306	C
ATOM	683	CD	GLU	83	3.939	1.063	-4.507	1.00	6.65		C
ANISOU	683	CD	GLU	83	820	838	868	209	307	229	C
ATOM	684	OE1	GLU	83	4.120	1.372	-5.699	1.00	8.00		O
ANISOU	684	OE1	GLU	83	1001	1095	945	124	353	338	O

Forb. Fig. 3c

ATOM	685	OE2	GLU	83	4.627	1.468	-3.541	1.00	7.12		O
ANISOU	685	OE2	GLU	83	882	887	935	24	351	240	O
ATOM	686	C	GLU	83	5.203	-1.442	-2.896	1.00	5.19		C
ANISOU	686	C	GLU	83	610	698	664	100	217	111	C
ATOM	687	O	GLU	83	5.871	-1.539	-3.933	1.00	5.40		O
ANISOU	687	O	GLU	83	603	802	645	35	207	175	O
ATOM	688	N	PHE	84	5.709	-1.029	-1.750	1.00	5.28		N
ANISOU	688	N	PHE	84	633	703	668	12	189	114	N
ATOM	689	CA	PHE	84	7.099	-0.672	-1.668	1.00	5.62		C
ANISOU	689	CA	PHE	84	597	775	762	-4	121	162	C
ATOM	690	CB	PHE	84	7.479	-0.135	-0.297	1.00	6.31		C
ANISOU	690	CB	PHE	84	745	796	858	-63	176	-40	C
ATOM	691	CG	PHE	84	7.170	1.305	0.000	1.00	7.91		C
ANISOU	691	CG	PHE	84	919	799	1286	-54	18	-88	C
ATOM	692	CD1	PHE	84	6.436	1.623	1.134	1.00	9.06		C
ANISOU	692	CD1	PHE	84	1077	930	1434	3	73	-318	C
ATOM	693	CD2	PHE	84	7.710	2.283	-0.813	1.00	11.89		C
ANISOU	693	CD2	PHE	84	2173	854	1491	-509	159	-100	C
ATOM	694	CE1	PHE	84	6.248	2.963	1.465	1.00	13.79		C
ANISOU	694	CE1	PHE	84	2596	1074	1569	381	63	-326	C
ATOM	695	CE2	PHE	84	7.468	3.597	-0.480	1.00	14.67		C
ANISOU	695	CE2	PHE	84	2841	977	1758	-353	-161	-29	C
ATOM	696	CZ	PHE	84	6.753	3.943	0.641	1.00	16.77		C
ANISOU	696	CZ	PHE	84	3463	857	2051	202	-25	-259	C
ATOM	697	C	PHE	84	8.017	-1.828	-2.050	1.00	5.60		C
ANISOU	697	C	PHE	84	617	821	688	-62	163	12	C
ATOM	698	O	PHE	84	9.070	-1.620	-2.649	1.00	6.19		O
ANISOU	698	O	PHE	84	563	915	875	-45	243	89	O
ATOM	699	N	LEU	85	7.620	-3.047	-1.691	1.00	5.43		N
ANISOU	699	N	LEU	85	590	750	721	70	189	107	N
ATOM	700	CA	LEU	85	8.330	-4.267	-2.041	1.00	5.50		C
ANISOU	700	CA	LEU	85	544	853	691	104	169	55	C
ATOM	701	CB	LEU	85	7.890	-5.410	-1.102	1.00	5.43		C
ANISOU	701	CB	LEU	85	565	750	748	52	113	96	C
ATOM	702	CG	LEU	85	8.334	-5.271	0.343	1.00	5.89		C
ANISOU	702	CG	LEU	85	682	810	748	142	67	-21	C
ATOM	703	CD1	LEU	85	7.529	-6.198	1.227	1.00	6.37		C
ANISOU	703	CD1	LEU	85	852	846	721	85	63	56	C
ATOM	704	CD2	LEU	85	9.809	-5.551	0.466	1.00	6.49		C
ANISOU	704	CD2	LEU	85	786	880	799	135	-6	-41	C
ATOM	705	C	LEU	85	8.139	-4.691	-3.479	1.00	5.64		C
ANISOU	705	C	LEU	85	549	896	700	60	179	59	C
ATOM	706	O	LEU	85	8.648	-5.746	-3.899	1.00	7.28		O
ANISOU	706	O	LEU	85	933	1069	763	356	226	1	O
ATOM	707	N	ASN	86	7.415	-3.909	-4.280	1.00	5.40		N
ANISOU	707	N	ASN	86	581	820	653	87	222	46	N
ATOM	708	CA	ASN	86	7.138	-4.233	-5.668	1.00	5.82		C
ANISOU	708	CA	ASN	86	680	916	614	11	272	73	C
ATOM	709	CB	ASN	86	8.396	-4.337	-6.532	1.00	6.62		C
ANISOU	709	CB	ASN	86	759	1085	671	-33	346	-17	C
ATOM	710	CG	ASN	86	9.234	-3.082	-6.369	1.00	7.03		C
ANISOU	710	CG	ASN	86	745	1187	740	-18	377	50	C
ATOM	711	OD1	ASN	86	8.762	-1.968	-6.638	1.00	8.69		O
ANISOU	711	OD1	ASN	86	1055	1042	1206	-82	425	106	O
ATOM	712	ND2	ASN	86	10.454	-3.275	-5.927	1.00	8.14		N
ANISOU	712	ND2	ASN	86	879	1274	939	-124	330	19	N
ATOM	713	C	ASN	86	6.267	-5.488	-5.797	1.00	5.78		C
ANISOU	713	C	ASN	86	616	913	668	69	213	-10	C
ATOM	714	O	ASN	86	6.250	-6.148	-6.824	1.00	7.15		O
ANISOU	714	O	ASN	86	837	1186	693	-53	301	-97	O
ATOM	715	N	ARG	87	5.487	-5.754	-4.761	1.00	5.48		N
ANISOU	715	N	ARG	87	596	816	671	75	233	-1	N
ATOM	716	CA	ARG	87	4.555	-6.872	-4.729	1.00	5.52		C
ANISOU	716	CA	ARG	87	631	780	686	58	223	-39	C
ATOM	717	CB	ARG	87	4.662	-7.593	-3.414	1.00	5.58		C
ANISOU	717	CB	ARG	87	613	674	835	79	205	32	C
ATOM	718	CG	ARG	87	5.942	-8.444	-3.391	1.00	6.81		C
ANISOU	718	CG	ARG	87	675	846	1066	117	206	99	C
ATOM	719	CD	ARG	87	6.347	-8.974	-2.043	1.00	7.59		C

Forb. Fig. 3c

ANISOU	719	CD	ARG	87	672	907	1307	70	160	280	C
ATOM	720	NE	ARG	87	5.358	-9.884	-1.492	1.00	6.49		N
ANISOU	720	NE	ARG	87	797	726	943	41	117	61	N
ATOM	721	CZ	ARG	87	5.467	-10.389	-0.270	1.00	6.76		C
ANISOU	721	CZ	ARG	87	758	745	1065	181	131	81	C
ATOM	722	NH1	ARG	87	6.507	-10.110	0.487	1.00	8.04		N
ANISOU	722	NH1	ARG	87	1036	847	1172	54	-143	108	N
ATOM	723	NH2	ARG	87	4.516	-11.189	0.158	1.00	7.63		N
ANISOU	723	NH2	ARG	87	927	967	1003	-1	153	190	N
ATOM	724	C	ARG	87	3.172	-6.323	-5.027	1.00	5.20		C
ANISOU	724	C	ARG	87	583	747	646	13	191	-32	C
ATOM	725	O	ARG	87	2.290	-6.203	-4.186	1.00	5.68		O
ANISOU	725	O	ARG	87	666	866	625	125	217	12	O
ATOM	726	N	PHE	88	3.009	-5.887	-6.290	1.00	6.07		N
ANISOU	726	N	PHE	88	644	963	699	125	238	56	N
ATOM	727	CA	PHE	88	1.869	-5.095	-6.675	1.00	6.05		C
ANISOU	727	CA	PHE	88	738	941	621	122	193	56	C
ATOM	728	CB	PHE	88	2.110	-4.498	-8.066	1.00	6.62		C
ANISOU	728	CB	PHE	88	784	1076	653	97	183	94	C
ATOM	729	CG	PHE	88	3.331	-3.614	-8.116	1.00	6.96		C
ANISOU	729	CG	PHE	88	819	1081	746	139	165	132	C
ATOM	730	CD1	PHE	88	3.390	-2.397	-7.446	1.00	7.82		C
ANISOU	730	CD1	PHE	88	898	967	1107	79	316	141	C
ATOM	731	CD2	PHE	88	4.445	-4.014	-8.829	1.00	7.31		C
ANISOU	731	CD2	PHE	88	921	1182	673	86	240	91	C
ATOM	732	CE1	PHE	88	4.514	-1.612	-7.485	1.00	8.88		C
ANISOU	732	CE1	PHE	88	1248	888	1240	6	321	126	C
ATOM	733	CE2	PHE	88	5.578	-3.207	-8.874	1.00	7.87		C
ANISOU	733	CE2	PHE	88	851	1373	767	125	232	132	C
ATOM	734	CZ	PHE	88	5.604	-2.026	-8.195	1.00	8.30		C
ANISOU	734	CZ	PHE	88	939	1195	1019	-6	177	366	C
ATOM	735	C	PHE	88	0.569	-5.892	-6.684	1.00	6.20		C
ANISOU	735	C	PHE	88	709	1050	598	140	223	46	C
ATOM	736	O	PHE	88	-0.467	-5.369	-6.327	1.00	6.74		O
ANISOU	736	O	PHE	88	695	1097	770	191	177	32	O
ATOM	737	N	GLU	89	0.624	-7.149	-7.118	1.00	6.72		N
ANISOU	737	N	GLU	89	765	1049	740	150	167	-92	N
ATOM	738	CA	GLU	89	-0.577	-7.955	-7.124	1.00	7.26		C
ANISOU	738	CA	GLU	89	819	1151	790	41	177	-105	C
ATOM	739	CB	AGLU	89	-0.343	-9.361	-7.716	0.53	9.69		C
ANISOU	739	CB	AGLU	89	1263	1283	1137	-26	237	-406	C
ATOM	740	CB	BGLU	89	-0.168	-9.291	-7.771	0.47	8.95		C
ANISOU	740	CB	BGLU	89	1241	1408	751	-64	141	-419	C
ATOM	741	CG	AGLU	89	-0.177	-9.322	-9.221	0.53	13.81		C
ANISOU	741	CG	AGLU	89	2007	2025	1217	-152	426	-656	C
ATOM	742	CG	BGLU	89	-1.403	-10.147	-7.802	0.47	11.57		C
ANISOU	742	CG	BGLU	89	1369	1362	1666	-185	244	-447	C
ATOM	743	CD	AGLU	89	-0.029	-10.684	-9.834	0.53	18.82		C
ANISOU	743	CD	AGLU	89	2388	2640	2121	112	787	-1422	C
ATOM	744	CD	BGLU	89	-1.138	-11.542	-8.303	0.47	15.05		C
ANISOU	744	CD	BGLU	89	2077	1279	2360	-236	755	-569	C
ATOM	745	OE1AGLU		89	0.036	-11.720	-9.175	0.53	22.98		O
ANISOU	745	OE1AGLU		89	3084	1932	3716	-192	1171	-1448	O
ATOM	746	OE1BGLU		89	-0.002	-12.045	-8.201	0.47	27.29		O
ANISOU	746	OE1BGLU		89	3174	2713	4481	1153	-672	-2121	O
ATOM	747	OE2AGLU		89	-0.010	-10.717	-11.078	0.53	30.92		O
ANISOU	747	OE2AGLU		89	5188	4357	2202	-1154	671	-2274	O
ATOM	748	OE2BGLU		89	-2.128	-12.134	-8.777	0.47	21.17		O
ANISOU	748	OE2BGLU		89	2507	1701	3833	-533	710	-1344	O
ATOM	749	C	GLU	89	-1.124	-8.124	-5.714	1.00	6.37		C
ANISOU	749	C	GLU	89	736	913	771	55	88	-153	C
ATOM	750	O	GLU	89	-2.315	-7.988	-5.458	1.00	6.87		O
ANISOU	750	O	GLU	89	700	1090	820	50	78	-28	O
ATOM	751	N	GLU	90	-0.226	-8.416	-4.795	1.00	5.91		N
ANISOU	751	N	GLU	90	650	839	756	64	121	-93	N
ATOM	752	CA	GLU	90	-0.632	-8.551	-3.409	1.00	5.38		C
ANISOU	752	CA	GLU	90	588	724	731	56	110	-23	C
ATOM	753	CB	GLU	90	0.520	-9.163	-2.593	1.00	5.77		C
ANISOU	753	CB	GLU	90	606	717	869	88	150	51	C

Forb. Frg. 3c

ATOM	754	CG	GLU	90	0.758	-10.616	-2.899	1.00	6.64		C
ANISOU	754	CG	GLU	90	714	726	1083	35	136	-118	C
ATOM	755	CD	GLU	90	2.109	-11.052	-2.357	1.00	7.02		C
ANISOU	755	CD	GLU	90	792	642	1235	16	127	-22	C
ATOM	756	OE1	GLU	90	2.145	-11.667	-1.272	1.00	8.95		O
ANISOU	756	OE1	GLU	90	902	1265	1231	92	111	318	O
ATOM	757	OE2	GLU	90	3.094	-10.725	-3.042	1.00	7.22		O
ANISOU	757	OE2	GLU	90	749	841	1152	169	145	18	O
ATOM	758	C	GLU	90	-1.061	-7.219	-2.802	1.00	5.30		C
ANISOU	758	C	GLU	90	565	807	641	66	102	9	C
ATOM	759	O	GLU	90	-1.988	-7.169	-2.005	1.00	5.57		O
ANISOU	759	O	GLU	90	629	736	752	88	201	22	O
ATOM	760	N	ALA	91	-0.395	-6.139	-3.168	1.00	5.13		N
ANISOU	760	N	ALA	91	541	741	668	109	161	-16	N
ATOM	761	CA	ALA	91	-0.808	-4.824	-2.696	1.00	5.05		C
ANISOU	761	CA	ALA	91	560	688	672	134	149	-11	C
ATOM	762	CB	ALA	91	0.093	-3.740	-3.196	1.00	5.69		C
ANISOU	762	CB	ALA	91	637	823	702	78	122	37	C
ATOM	763	C	ALA	91	-2.256	-4.565	-3.128	1.00	5.10		C
ANISOU	763	C	ALA	91	579	683	677	108	111	68	C
ATOM	764	O	ALA	91	-3.079	-4.125	-2.346	1.00	5.25		O
ANISOU	764	O	ALA	91	571	689	734	102	178	13	O
ATOM	765	N	LYS	92	-2.552	-4.844	-4.412	1.00	5.47		N
ANISOU	765	N	LYS	92	591	869	618	139	131	13	N
ATOM	766	CA	LYS	92	-3.895	-4.639	-4.913	1.00	5.60		C
ANISOU	766	CA	LYS	92	652	850	628	89	54	43	C
ATOM	767	CB	LYS	92	-3.988	-5.020	-6.393	1.00	6.39		C
ANISOU	767	CB	LYS	92	789	1028	611	102	93	-8	C
ATOM	768	CG	LYS	92	-5.325	-4.677	-6.979	1.00	7.19		C
ANISOU	768	CG	LYS	92	748	1183	802	-13	-10	-31	C
ATOM	769	CD	LYS	92	-5.439	-5.012	-8.441	1.00	8.85		C
ANISOU	769	CD	LYS	92	1057	1529	778	15	-90	5	C
ATOM	770	CE	ALYS	92	-6.765	-4.495	-9.033	0.86	10.12		C
ANISOU	770	CE	ALYS	92	1246	1620	980	-91	-280	197	C
ATOM	771	CE	BLYS	92	-6.730	-4.513	-9.073	0.14	11.04		C
ANISOU	771	CE	BLYS	92	1406	1511	1277	-130	-551	272	C
ATOM	772	NZ	ALYS	92	-6.978	-4.906	-10.433	0.86	11.75		N
ANISOU	772	NZ	ALYS	92	1948	1424	1094	138	-605	-83	N
ATOM	773	NZ	BLYS	92	-6.367	-3.066	-9.122	0.14	15.23		N
ANISOU	773	NZ	BLYS	92	2183	1434	2168	-77	-675	291	N
ATOM	774	C	LYS	92	-4.929	-5.440	-4.112	1.00	5.71		C
ANISOU	774	C	LYS	92	571	947	649	159	35	-50	C
ATOM	775	O	LYS	92	-5.962	-4.937	-3.722	1.00	6.09		O
ANISOU	775	O	LYS	92	595	1032	688	114	85	15	O
ATOM	776	N	ARG	93	-4.622	-6.727	-3.885	1.00	5.95		N
ANISOU	776	N	ARG	93	643	867	751	115	106	-71	N
ATOM	777	CA	ARG	93	-5.524	-7.552	-3.145	1.00	6.29		C
ANISOU	777	CA	ARG	93	650	964	775	-17	32	-77	C
ATOM	778	CB	ARG	93	-4.962	-8.980	-3.082	1.00	7.58		C
ANISOU	778	CB	ARG	93	1021	896	962	157	149	-267	C
ATOM	779	CG	ARG	93	-5.930	-9.972	-2.553	1.00	16.75		C
ANISOU	779	CG	ARG	93	2817	1254	2293	-352	1086	221	C
ATOM	780	CD	ARG	93	-5.080	-11.225	-2.320	1.00	23.32		C
ANISOU	780	CD	ARG	93	4170	1148	3541	74	1341	198	C
ATOM	781	NE	ARG	93	-4.615	-11.688	-3.631	1.00	28.18		N
ANISOU	781	NE	ARG	93	4978	1585	4144	-195	2218	-337	N
ATOM	782	CZ	ARG	93	-3.409	-11.682	-4.164	1.00	33.24		C
ANISOU	782	CZ	ARG	93	4776	3124	4729	-7	2154	-262	C
ATOM	783	NH1	ARG	93	-2.362	-11.183	-3.513	1.00	49.57		N
ANISOU	783	NH1	ARG	93	5121	5977	7736	-544	562	273	N
ATOM	784	NH2	ARG	93	-3.149	-12.166	-5.388	1.00	40.00		N
ANISOU	784	NH2	ARG	93	7101	3731	4367	905	3416	917	N
ATOM	785	C	ARG	93	-5.731	-6.999	-1.734	1.00	5.60		C
ANISOU	785	C	ARG	93	646	729	752	43	114	-106	C
ATOM	786	O	ARG	93	-6.843	-7.089	-1.194	1.00	6.24		O
ANISOU	786	O	ARG	93	590	922	860	1	88	-45	O
ATOM	787	N	THR	94	-4.690	-6.479	-1.116	1.00	5.37		N
ANISOU	787	N	THR	94	508	866	669	97	138	-24	N
ATOM	788	CA	THR	94	-4.806	-5.955	0.230	1.00	5.04		C

Forb. Fig. 3c

ANISOU	788	CA	THR	94	547	714	655	129	96	-4	C
ATOM	789	CB	THR	94	-3.405	-5.741	0.814	1.00	5.62		C
ANISOU	789	CB	THR	94	485	902	748	85	118	29	C
ATOM	790	OG1	THR	94	-2.702	-6.989	0.810	1.00	6.92		O
ANISOU	790	OG1	THR	94	653	1036	941	319	-9	-35	O
ATOM	791	CG2	THR	94	-3.483	-5.275	2.244	1.00	5.75		C
ANISOU	791	CG2	THR	94	675	869	643	1	35	3	C
ATOM	792	C	THR	94	-5.622	-4.668	0.260	1.00	5.09		C
ANISOU	792	C	THR	94	509	760	665	65	156	8	C
ATOM	793	O	THR	94	-6.438	-4.487	1.165	1.00	5.43		O
ANISOU	793	O	THR	94	597	850	615	87	124	39	O
ATOM	794	N	TYR	95	-5.438	-3.811	-0.734	1.00	5.28		N
ANISOU	794	N	TYR	95	576	789	641	78	197	39	N
ATOM	795	CA	TYR	95	-6.319	-2.664	-0.827	1.00	5.41		C
ANISOU	795	CA	TYR	95	634	771	651	114	157	74	C
ATOM	796	CB	TYR	95	-5.884	-1.723	-1.975	1.00	6.16		C
ANISOU	796	CB	TYR	95	773	745	823	125	215	172	C
ATOM	797	CG	TYR	95	-4.652	-0.920	-1.681	1.00	6.61		C
ANISOU	797	CG	TYR	95	802	715	994	181	256	158	C
ATOM	798	CD1	TYR	95	-3.480	-0.987	-2.414	1.00	7.17		C
ANISOU	798	CD1	TYR	95	878	756	1091	194	424	290	C
ATOM	799	CE1	TYR	95	-2.354	-0.200	-2.061	1.00	7.36		C
ANISOU	799	CE1	TYR	95	731	922	1144	223	355	292	C
ATOM	800	CD2	TYR	95	-4.642	-0.067	-0.578	1.00	7.24		C
ANISOU	800	CD2	TYR	95	823	866	1063	87	270	79	C
ATOM	801	CE2	TYR	95	-3.542	0.684	-0.214	1.00	7.17		C
ANISOU	801	CE2	TYR	95	774	844	1107	60	254	118	C
ATOM	802	CZ	TYR	95	-2.409	0.602	-0.964	1.00	7.32		C
ANISOU	802	CZ	TYR	95	896	749	1136	76	272	262	C
ATOM	803	OH	TYR	95	-1.269	1.293	-0.620	1.00	8.78		O
ANISOU	803	OH	TYR	95	823	1077	1436	-31	312	240	O
ATOM	804	C	TYR	95	-7.764	-3.093	-1.003	1.00	5.70		C
ANISOU	804	C	TYR	95	668	771	729	184	140	92	C
ATOM	805	O	TYR	95	-8.669	-2.538	-0.370	1.00	6.20		O
ANISOU	805	O	TYR	95	693	829	834	193	243	140	O
ATOM	806	N	GLU	96	-8.033	-4.066	-1.876	1.00	5.82		N
ANISOU	806	N	GLU	96	617	878	716	158	120	32	N
ATOM	807	CA	GLU	96	-9.363	-4.577	-2.060	1.00	6.08		C
ANISOU	807	CA	GLU	96	615	994	701	115	57	93	C
ATOM	808	CB	GLU	96	-9.407	-5.701	-3.100	1.00	6.29		C
ANISOU	808	CB	GLU	96	728	929	732	4	103	82	C
ATOM	809	CG	GLU	96	-9.113	-5.211	-4.514	1.00	7.01		C
ANISOU	809	CG	GLU	96	782	1170	710	-77	52	77	C
ATOM	810	CD	GLU	96	-8.882	-6.327	-5.526	1.00	9.06		C
ANISOU	810	CD	GLU	96	1449	1129	864	-61	-21	-86	C
ATOM	811	OE1	GLU	96	-8.438	-7.410	-5.153	1.00	11.49		O
ANISOU	811	OE1	GLU	96	1689	1414	1262	426	-193	-155	O
ATOM	812	OE2	GLU	96	-9.011	-6.057	-6.731	1.00	12.50		O
ANISOU	812	OE2	GLU	96	2521	1359	868	82	-55	-38	O
ATOM	813	C	GLU	96	-9.949	-5.088	-0.754	1.00	6.13		C
ANISOU	813	C	GLU	96	585	939	806	156	130	79	C
ATOM	814	O	GLU	96	-11.117	-4.839	-0.417	1.00	6.63		O
ANISOU	814	O	GLU	96	630	1054	837	133	177	121	O
ATOM	815	N	GLU	97	-9.161	-5.847	0.019	1.00	5.71		N
ANISOU	815	N	GLU	97	635	828	705	175	148	48	N
ATOM	816	CA	GLU	97	-9.663	-6.368	1.277	1.00	5.79		C
ANISOU	816	CA	GLU	97	718	753	730	61	136	-7	C
ATOM	817	CB	GLU	97	-8.686	-7.337	1.908	1.00	6.73		C
ANISOU	817	CB	GLU	97	903	767	885	178	31	61	C
ATOM	818	CG	GLU	97	-9.265	-7.965	3.167	1.00	10.10		C
ANISOU	818	CG	GLU	97	1419	1131	1288	-170	-77	278	C
ATOM	819	CD	GLU	97	-10.557	-8.712	3.182	1.00	11.77		C
ANISOU	819	CD	GLU	97	1529	1425	1520	-251	188	-14	C
ATOM	820	OE1	GLU	97	-10.731	-9.483	2.221	1.00	17.47		O
ANISOU	820	OE1	GLU	97	2408	1411	2819	-162	-611	-602	O
ATOM	821	OE2	GLU	97	-11.384	-8.618	4.133	1.00	16.75		O
ANISOU	821	OE2	GLU	97	1632	2644	2088	-114	448	649	O
ATOM	822	C	GLU	97	-9.947	-5.201	2.240	1.00	5.70		C
ANISOU	822	C	GLU	97	659	750	756	65	126	28	C

Forb. Fig. 3c

ATOM	823	O	GLU	97	-10.991	-5.195	2.886	1.00	6.26		O
ANISOU	823	O	GLU	97	632	825	921	-31	275	53	O
ATOM	824	N	GLY	98	-9.052	-4.261	2.321	1.00	5.33		N
ANISOU	824	N	GLY	98	527	828	669	35	157	87	N
ATOM	825	CA	GLY	98	-9.265	-3.157	3.236	1.00	5.20		C
ANISOU	825	CA	GLY	98	520	794	663	6	72	24	C
ATOM	826	C	GLY	98	-10.520	-2.378	2.908	1.00	4.90		C
ANISOU	826	C	GLY	98	483	742	636	-14	85	22	C
ATOM	827	O	GLY	98	-11.223	-1.932	3.813	1.00	5.12		O
ANISOU	827	O	GLY	98	508	745	693	-19	91	5	O
ATOM	828	N	LEU	99	-10.813	-2.217	1.631	1.00	5.19		N
ANISOU	828	N	LEU	99	513	742	717	59	125	35	N
ATOM	829	CA	LEU	99	-11.999	-1.473	1.205	1.00	5.16		C
ANISOU	829	CA	LEU	99	577	726	658	60	54	80	C
ATOM	830	CB	LEU	99	-11.870	-1.167	-0.287	1.00	5.52		C
ANISOU	830	CB	LEU	99	702	746	649	65	121	39	C
ATOM	831	CG	LEU	99	-10.807	-0.119	-0.606	1.00	5.80		C
ANISOU	831	CG	LEU	99	593	839	771	107	209	120	C
ATOM	832	CD1	LEU	99	-10.442	-0.131	-2.078	1.00	7.29		C
ANISOU	832	CD1	LEU	99	877	998	895	188	368	198	C
ATOM	833	CD2	LEU	99	-11.266	1.271	-0.199	1.00	6.04		C
ANISOU	833	CD2	LEU	99	614	804	875	40	121	130	C
ATOM	834	C	LEU	99	-13.287	-2.212	1.523	1.00	5.26		C
ANISOU	834	C	LEU	99	570	753	675	8	111	0	C
ATOM	835	O	LEU	99	-14.321	-1.540	1.533	1.00	6.35		O
ANISOU	835	O	LEU	99	522	803	1087	79	103	35	O
ATOM	836	N	LYS	100	-13.245	-3.492	1.826	1.00	5.20		N
ANISOU	836	N	LYS	100	524	677	775	22	45	-60	N
ATOM	837	CA	LYS	100	-14.433	-4.167	2.342	1.00	5.27		C
ANISOU	837	CA	LYS	100	530	782	692	-58	32	-37	C
ATOM	838	CB	LYS	100	-14.277	-5.673	2.256	1.00	5.89		C
ANISOU	838	CB	LYS	100	672	745	819	-94	122	-92	C
ATOM	839	CG	LYS	100	-14.143	-6.177	0.843	1.00	7.96		C
ANISOU	839	CG	LYS	100	1107	919	997	-120	175	-169	C
ATOM	840	CD	LYS	100	-13.985	-7.651	0.758	1.00	10.83		C
ANISOU	840	CD	LYS	100	1536	931	1647	-76	397	-326	C
ATOM	841	CE	LYS	100	-13.654	-8.067	-0.672	1.00	17.15		C
ANISOU	841	CE	LYS	100	2974	1416	2126	-16	656	-819	C
ATOM	842	NZ	LYS	100	-13.630	-9.535	-0.841	1.00	23.24		N
ANISOU	842	NZ	LYS	100	4753	1454	2622	447	-11	-1020	N
ATOM	843	C	LYS	100	-14.730	-3.754	3.776	1.00	5.82		C
ANISOU	843	C	LYS	100	621	782	807	-73	104	-108	C
ATOM	844	O	LYS	100	-15.849	-3.940	4.241	1.00	7.85		O
ANISOU	844	O	LYS	100	596	1385	1003	-262	227	-355	O
ATOM	845	N	HIS	101	-13.726	-3.289	4.492	1.00	5.09		N
ANISOU	845	N	HIS	101	558	756	621	-115	105	5	N
ATOM	846	CA	HIS	101	-13.883	-2.836	5.853	1.00	5.65		C
ANISOU	846	CA	HIS	101	694	806	646	-160	157	-42	C
ATOM	847	CB	HIS	101	-12.649	-3.298	6.696	1.00	6.36		C
ANISOU	847	CB	HIS	101	885	871	662	-132	2	63	C
ATOM	848	CG	HIS	101	-12.483	-4.800	6.715	1.00	7.01		C
ANISOU	848	CG	HIS	101	732	1011	920	-102	56	65	C
ATOM	849	CD2	HIS	101	-11.911	-5.614	5.818	1.00	7.80		C
ANISOU	849	CD2	HIS	101	793	894	1278	170	110	104	C
ATOM	850	ND1	HIS	101	-13.009	-5.586	7.679	1.00	7.81		N
ANISOU	850	ND1	HIS	101	996	869	1103	-109	131	89	N
ATOM	851	CE1	HIS	101	-12.744	-6.836	7.376	1.00	8.68		C
ANISOU	851	CE1	HIS	101	917	868	1513	-34	-25	131	C
ATOM	852	NE2	HIS	101	-12.047	-6.893	6.269	1.00	9.64		N
ANISOU	852	NE2	HIS	101	994	925	1745	-2	55	-112	N
ATOM	853	C	HIS	101	-14.058	-1.339	5.958	1.00	5.40		C
ANISOU	853	C	HIS	101	603	778	672	-151	83	0	C
ATOM	854	O	HIS	101	-14.700	-0.872	6.892	1.00	6.40		O
ANISOU	854	O	HIS	101	792	902	738	-197	299	-72	O
ATOM	855	N	GLU	102	-13.455	-0.587	5.042	1.00	5.07		N
ANISOU	855	N	GLU	102	480	779	666	-85	214	-6	N
ATOM	856	CA	GLU	102	-13.509	0.848	5.103	1.00	5.19		C
ANISOU	856	CA	GLU	102	468	810	693	-40	198	-4	C
ATOM	857	CB	GLU	102	-12.399	1.447	5.992	1.00	5.58		C

For Fig. 3c

ANISOU	857	CB	GLU	102	507	824	789	-70	191	-50	C
ATOM	858	CG	GLU	102	-12.703	2.886	6.307	1.00	6.11		C
ANISOU	858	CG	GLU	102	503	833	986	-5	178	-32	C
ATOM	859	CD	GLU	102	-11.674	3.661	7.063	1.00	8.00		C
ANISOU	859	CD	GLU	102	727	1053	1260	68	77	-385	C
ATOM	860	OE1	GLU	102	-11.971	4.848	7.261	1.00	9.78		O
ANISOU	860	OE1	GLU	102	1070	1020	1625	2	-79	-159	O
ATOM	861	OE2	GLU	102	-10.545	3.191	7.289	1.00	6.50		O
ANISOU	861	OE2	GLU	102	627	1035	808	-28	185	-67	O
ATOM	862	C	GLU	102	-13.461	1.414	3.682	1.00	5.36		C
ANISOU	862	C	GLU	102	551	775	710	14	197	-3	C
ATOM	863	O	GLU	102	-12.480	1.970	3.227	1.00	5.68		O
ANISOU	863	O	GLU	102	536	799	821	-67	209	38	O
ATOM	864	N	ALA	103	-14.583	1.249	2.972	1.00	5.22		N
ANISOU	864	N	ALA	103	557	814	613	-62	192	-7	N
ATOM	865	CA	ALA	103	-14.661	1.613	1.551	1.00	5.52		C
ANISOU	865	CA	ALA	103	560	869	668	-13	171	64	C
ATOM	866	CB	ALA	103	-16.004	1.260	0.980	1.00	6.19		C
ANISOU	866	CB	ALA	103	616	977	757	-58	158	24	C
ATOM	867	C	ALA	103	-14.376	3.088	1.351	1.00	5.50		C
ANISOU	867	C	ALA	103	575	823	691	3	139	11	C
ATOM	868	O	ALA	103	-13.966	3.477	0.256	1.00	6.41		O
ANISOU	868	O	ALA	103	756	833	847	12	238	107	O
ATOM	869	N	ASN	104	-14.606	3.922	2.350	1.00	5.82		N
ANISOU	869	N	ASN	104	679	725	806	-13	162	91	N
ATOM	870	CA	ASN	104	-14.448	5.357	2.194	1.00	6.65		C
ANISOU	870	CA	ASN	104	856	655	1015	145	175	53	C
ATOM	871	CB	ASN	104	-15.578	6.079	2.874	1.00	7.04		C
ANISOU	871	CB	ASN	104	885	822	970	123	164	40	C
ATOM	872	CG	ASN	104	-16.880	5.787	2.180	1.00	7.22		C
ANISOU	872	CG	ASN	104	852	1018	875	223	128	94	C
ATOM	873	OD1	ASN	104	-16.915	5.784	0.938	1.00	10.13		O
ANISOU	873	OD1	ASN	104	801	2005	1042	97	63	274	O
ATOM	874	ND2	ASN	104	-17.910	5.493	2.900	1.00	8.95		N
ANISOU	874	ND2	ASN	104	835	1394	1171	87	172	42	N
ATOM	875	C	ASN	104	-13.114	5.853	2.663	1.00	7.44		C
ANISOU	875	C	ASN	104	898	746	1184	33	168	-36	C
ATOM	876	O	ASN	104	-12.862	7.065	2.694	1.00	9.68		O
ANISOU	876	O	ASN	104	1023	694	1962	-67	-193	-19	O
ATOM	877	N	ASN	105	-12.165	4.969	2.964	1.00	6.10		N
ANISOU	877	N	ASN	105	635	683	998	-31	266	-19	N
ATOM	878	CA	ASN	105	-10.840	5.368	3.371	1.00	6.21		C
ANISOU	878	CA	ASN	105	706	763	890	-75	202	-44	C
ATOM	879	CB	ASN	105	-10.085	4.137	3.877	1.00	5.76		C
ANISOU	879	CB	ASN	105	560	775	854	-91	170	29	C
ATOM	880	CG	ASN	105	-8.687	4.436	4.363	1.00	6.49		C
ANISOU	880	CG	ASN	105	567	842	1057	-114	217	-23	C
ATOM	881	OD1	ASN	105	-7.865	4.923	3.599	1.00	6.50		O
ANISOU	881	OD1	ASN	105	656	868	948	-223	192	21	O
ATOM	882	ND2	ASN	105	-8.384	4.111	5.599	1.00	7.09		N
ANISOU	882	ND2	ASN	105	628	1131	932	-135	176	169	N
ATOM	883	C	ASN	105	-10.074	5.962	2.178	1.00	6.19		C
ANISOU	883	C	ASN	105	669	664	1018	-4	238	43	C
ATOM	884	O	ASN	105	-9.917	5.262	1.165	1.00	6.30		O
ANISOU	884	O	ASN	105	743	726	924	3	211	90	O
ATOM	885	N	PRO	106	-9.655	7.213	2.211	1.00	6.95		N
ANISOU	885	N	PRO	106	784	718	1140	-56	306	44	N
ATOM	886	CD	APRO	106	-9.780	8.217	3.280	0.65	8.29		C
ANISOU	886	CD	APRO	106	1039	781	1331	-47	424	-112	C
ATOM	887	CD	BPRO	106	-9.859	8.189	3.299	0.35	7.50		C
ANISOU	887	CD	BPRO	106	931	645	1273	-312	340	3	C
ATOM	888	CA	PRO	106	-9.074	7.805	1.015	1.00	7.84		C
ANISOU	888	CA	PRO	106	919	722	1337	-58	364	168	C
ATOM	889	CB	APRO	106	-8.913	9.312	1.352	0.65	10.20		C
ANISOU	889	CB	APRO	106	1489	623	1765	241	646	201	C
ATOM	890	CB	BPRO	106	-8.781	9.241	1.508	0.35	9.27		C
ANISOU	890	CB	BPRO	106	1232	737	1553	27	714	85	C
ATOM	891	CG	APRO	106	-8.868	9.309	2.814	0.65	10.07		C
ANISOU	891	CG	APRO	106	1248	808	1770	-155	530	-190	C

Fords. Fig. 3c

ATOM	892	CG	BPRO	106	-9.662	9.532	2.641	0.35	7.83		C
ANISOU	892	CG	BPRO	106	1097	693	1187	-107	436	174	C
ATOM	893	C	PRO	106	-7.779	7.141	0.610	1.00	6.63		C
ANISOU	893	C	PRO	106	849	609	1060	-86	311	105	C
ATOM	894	O	PRO	106	-7.487	7.036	-0.599	1.00	7.22		O
ANISOU	894	O	PRO	106	907	750	1087	-40	305	171	O
ATOM	895	N	GLN	107	-6.939	6.780	1.550	1.00	6.77		N
ANISOU	895	N	GLN	107	760	853	958	-151	220	-5	N
ATOM	896	CA	GLN	107	-5.660	6.132	1.218	1.00	7.04		C
ANISOU	896	CA	GLN	107	788	702	1185	-152	200	-32	C
ATOM	897	CB	GLN	107	-4.746	6.033	2.411	1.00	7.94		C
ANISOU	897	CB	GLN	107	745	1001	1270	-198	109	-127	C
ATOM	898	CG	GLN	107	-4.308	7.378	2.972	1.00	8.45		C
ANISOU	898	CG	GLN	107	759	1080	1370	-322	135	-115	C
ATOM	899	CD	GLN	107	-5.329	8.047	3.849	1.00	7.74		C
ANISOU	899	CD	GLN	107	834	967	1138	-287	188	-24	C
ATOM	900	OE1	GLN	107	-6.230	7.416	4.391	1.00	9.18		O
ANISOU	900	OE1	GLN	107	1093	1054	1341	-438	366	6	O
ATOM	901	NE2	GLN	107	-5.223	9.344	4.023	1.00	8.59		N
ANISOU	901	NE2	GLN	107	987	915	1362	-325	244	143	N
ATOM	902	C	GLN	107	-5.905	4.790	0.580	1.00	6.21		C
ANISOU	902	C	GLN	107	640	791	930	-101	138	50	C
ATOM	903	O	GLN	107	-5.189	4.413	-0.382	1.00	6.41		O
ANISOU	903	O	GLN	107	675	774	988	-65	175	76	O
ATOM	904	N	LEU	108	-6.847	4.021	1.085	1.00	5.84		N
ANISOU	904	N	LEU	108	638	738	843	-49	110	56	N
ATOM	905	CA	LEU	108	-7.122	2.731	0.463	1.00	5.56		C
ANISOU	905	CA	LEU	108	593	571	947	-40	113	135	C
ATOM	906	CB	LEU	108	-8.085	1.909	1.317	1.00	5.61		C
ANISOU	906	CB	LEU	108	582	755	796	-49	78	110	C
ATOM	907	CG	LEU	108	-7.591	1.501	2.711	1.00	5.87		C
ANISOU	907	CG	LEU	108	691	643	896	6	49	141	C
ATOM	908	CD1	LEU	108	-8.688	0.732	3.397	1.00	6.61		C
ANISOU	908	CD1	LEU	108	761	845	905	-61	132	142	C
ATOM	909	CD2	LEU	108	-6.351	0.654	2.632	1.00	7.56		C
ANISOU	909	CD2	LEU	108	733	1130	1011	28	18	366	C
ATOM	910	C	LEU	108	-7.686	2.882	-0.941	1.00	5.56		C
ANISOU	910	C	LEU	108	630	619	863	-3	216	81	C
ATOM	911	O	LEU	108	-7.337	2.152	-1.849	1.00	5.90		O
ANISOU	911	O	LEU	108	687	707	850	-20	127	117	O
ATOM	912	N	LYS	109	-8.578	3.846	-1.110	1.00	5.76		N
ANISOU	912	N	LYS	109	648	762	778	30	148	144	N
ATOM	913	CA	LYS	109	-9.161	4.086	-2.427	1.00	5.92		C
ANISOU	913	CA	LYS	109	721	699	829	48	110	147	C
ATOM	914	CB	LYS	109	-10.202	5.181	-2.377	1.00	6.85		C
ANISOU	914	CB	LYS	109	711	861	1031	117	191	172	C
ATOM	915	CG	ALYS	109	-11.491	4.719	-1.708	0.43	6.76		C
ANISOU	915	CG	ALYS	109	609	1074	884	111	56	388	C
ATOM	916	CG	BLYS	109	-11.531	4.818	-1.779	0.57	8.09		C
ANISOU	916	CG	BLYS	109	900	793	1379	-14	530	133	C
ATOM	917	CD	ALYS	109	-12.307	5.909	-1.273	0.43	11.84		C
ANISOU	917	CD	ALYS	109	1033	1068	2397	267	877	695	C
ATOM	918	CD	BLYS	109	-12.437	5.980	-1.452	0.57	12.52		C
ANISOU	918	CD	BLYS	109	919	1331	2505	503	678	770	C
ATOM	919	CE	ALYS	109	-12.787	6.736	-2.408	0.43	14.26		C
ANISOU	919	CE	ALYS	109	886	1573	2960	502	933	1145	C
ATOM	920	CE	BLYS	109	-12.696	6.905	-2.619	0.57	15.83		C
ANISOU	920	CE	BLYS	109	1316	1683	3017	31	82	1137	C
ATOM	921	NZ	ALYS	109	-13.522	7.960	-2.046	0.43	14.95		N
ANISOU	921	NZ	ALYS	109	1366	2058	2256	995	580	826	N
ATOM	922	NZ	BLYS	109	-13.677	6.184	-3.509	0.57	19.27		N
ANISOU	922	NZ	BLYS	109	2676	2560	2087	-827	359	711	N
ATOM	923	C	LYS	109	-8.060	4.444	-3.402	1.00	6.30		C
ANISOU	923	C	LYS	109	808	679	906	59	278	133	C
ATOM	924	O	LYS	109	-8.081	3.955	-4.538	1.00	6.75		O
ANISOU	924	O	LYS	109	856	816	893	114	173	113	O
ATOM	925	N	GLU	110	-7.150	5.318	-3.006	1.00	6.24		N
ANISOU	925	N	GLU	110	765	697	909	25	260	155	N
ATOM	926	CA	GLU	110	-6.093	5.751	-3.882	1.00	6.62		C

Forb. Fig. 3c

ANISOU	926	CA	GLU	110	894	588	1035	1	332	86	C
ATOM	927	CB	GLU	110	-5.357	6.907	-3.226	1.00	6.55		C
ANISOU	927	CB	GLU	110	846	676	965	28	356	97	C
ATOM	928	CG	GLU	110	-4.235	7.462	-4.068	1.00	6.53		C
ANISOU	928	CG	GLU	110	795	801	884	-53	351	32	C
ATOM	929	CD	GLU	110	-3.525	8.645	-3.461	1.00	6.89		C
ANISOU	929	CD	GLU	110	993	597	1029	29	330	3	C
ATOM	930	OE1	GLU	110	-3.811	9.003	-2.314	1.00	11.70		O
ANISOU	930	OE1	GLU	110	2342	946	1158	-435	698	-160	O
ATOM	931	OE2	GLU	110	-2.649	9.198	-4.129	1.00	8.78		O
ANISOU	931	OE2	GLU	110	1137	662	1535	-136	516	-180	O
ATOM	932	C	GLU	110	-5.129	4.634	-4.221	1.00	6.52		C
ANISOU	932	C	GLU	110	736	704	1038	-80	347	51	C
ATOM	933	O	GLU	110	-4.696	4.484	-5.341	1.00	7.14		O
ANISOU	933	O	GLU	110	952	692	1067	-44	353	53	O
ATOM	934	N	GLY	111	-4.802	3.808	-3.198	1.00	6.30		N
ANISOU	934	N	GLY	111	717	693	983	65	210	98	N
ATOM	935	CA	GLY	111	-3.940	2.685	-3.447	1.00	6.44		C
ANISOU	935	CA	GLY	111	635	789	1023	25	203	0	C
ATOM	936	C	GLY	111	-4.541	1.704	-4.470	1.00	5.80		C
ANISOU	936	C	GLY	111	745	621	839	97	145	34	C
ATOM	937	O	GLY	111	-3.867	1.264	-5.386	1.00	6.61		O
ANISOU	937	O	GLY	111	740	698	1073	74	274	27	O
ATOM	938	N	LEU	112	-5.828	1.405	-4.309	1.00	5.85		N
ANISOU	938	N	LEU	112	768	678	779	74	233	-7	N
ATOM	939	CA	LEU	112	-6.466	0.533	-5.288	1.00	5.94		C
ANISOU	939	CA	LEU	112	770	817	671	46	131	71	C
ATOM	940	CB	LEU	112	-7.901	0.224	-4.917	1.00	6.10		C
ANISOU	940	CB	LEU	112	745	787	785	31	180	41	C
ATOM	941	CG	LEU	112	-8.591	-0.668	-5.951	1.00	6.90		C
ANISOU	941	CG	LEU	112	708	1125	787	-95	109	24	C
ATOM	942	CD1	LEU	112	-7.884	-1.953	-6.203	1.00	8.21		C
ANISOU	942	CD1	LEU	112	1097	1043	980	-236	153	-144	C
ATOM	943	CD2	LEU	112	-10.065	-0.940	-5.532	1.00	9.13		C
ANISOU	943	CD2	LEU	112	888	1460	1123	-286	139	-232	C
ATOM	944	C	LEU	112	-6.407	1.160	-6.670	1.00	6.27		C
ANISOU	944	C	LEU	112	717	844	821	30	227	153	C
ATOM	945	O	LEU	112	-6.061	0.507	-7.648	1.00	6.75		O
ANISOU	945	O	LEU	112	814	941	808	99	195	71	O
ATOM	946	N	GLN	113	-6.778	2.451	-6.773	1.00	6.76		N
ANISOU	946	N	GLN	113	783	860	926	186	134	175	N
ATOM	947	CA	GLN	113	-6.777	3.109	-8.072	1.00	8.55		C
ANISOU	947	CA	GLN	113	1024	1252	973	249	219	422	C
ATOM	948	CB	GLN	113	-7.241	4.556	-7.862	1.00	12.18		C
ANISOU	948	CB	GLN	113	1715	1449	1463	737	566	672	C
ATOM	949	CG	GLN	113	-7.376	5.459	-9.010	1.00	17.82		C
ANISOU	949	CG	GLN	113	2472	2190	2110	1052	924	1290	C
ATOM	950	CD	GLN	113	-7.938	6.820	-8.589	1.00	22.27		C
ANISOU	950	CD	GLN	113	2621	1646	4193	729	148	965	C
ATOM	951	OE1	GLN	113	-7.386	7.872	-8.137	1.00	42.55		O
ANISOU	951	OE1	GLN	113	4048	2382	9738	-105	-257	-285	O
ATOM	952	NE2	GLN	113	-9.267	6.844	-8.759	1.00	20.92		N
ANISOU	952	NE2	GLN	113	2563	2318	3069	1087	398	986	N
ATOM	953	C	GLN	113	-5.398	3.016	-8.698	1.00	8.02		C
ANISOU	953	C	GLN	113	1119	960	967	120	331	288	C
ATOM	954	O	GLN	113	-5.295	2.800	-9.922	1.00	8.78		O
ANISOU	954	O	GLN	113	1205	1159	971	93	318	230	O
ATOM	955	N	ASN	114	-4.337	3.253	-7.940	1.00	7.87		N
ANISOU	955	N	ASN	114	1003	882	1105	109	411	176	N
ATOM	956	CA	ASN	114	-3.030	3.121	-8.489	1.00	8.82		C
ANISOU	956	CA	ASN	114	1109	888	1353	88	450	367	C
ATOM	957	CB	ASN	114	-2.001	3.500	-7.436	1.00	9.89		C
ANISOU	957	CB	ASN	114	1020	980	1757	-39	416	137	C
ATOM	958	CG	ASN	114	-1.934	4.948	-7.019	1.00	12.08		C
ANISOU	958	CG	ASN	114	860	971	2758	-100	382	14	C
ATOM	959	OD1	ASN	114	-2.408	5.795	-7.747	1.00	16.08		O
ANISOU	959	OD1	ASN	114	1654	945	3512	-32	225	459	O
ATOM	960	ND2	ASN	114	-1.323	5.265	-5.921	1.00	12.92		N
ANISOU	960	ND2	ASN	114	1140	1261	2508	-378	735	-318	N

37/137

Fom. Fig. 3c

ATOM	961	C	ASN	114	-2.768	1.743	-9.028	1.00	8.06		C
ANISOU	961	C	ASN	114	1025	976	1063	76	462	260	C
ATOM	962	O	ASN	114	-2.148	1.546	-10.091	1.00	9.99		O
ANISOU	962	O	ASN	114	1374	1251	1172	98	580	265	O
ATOM	963	N	MET	115	-3.166	0.708	-8.306	1.00	6.92		N
ANISOU	963	N	MET	115	800	923	908	96	275	120	N
ATOM	964	CA	MET	115	-2.946	-0.635	-8.766	1.00	7.32		C
ANISOU	964	CA	MET	115	910	986	887	103	144	114	C
ATOM	965	CB	MET	115	-3.121	-1.620	-7.633	1.00	7.54		C
ANISOU	965	CB	MET	115	1089	961	814	270	296	119	C
ATOM	966	CG	MET	115	-2.145	-1.458	-6.473	1.00	7.98		C
ANISOU	966	CG	MET	115	1249	846	939	288	255	53	C
ATOM	967	SD	MET	115	-0.387	-1.627	-6.910	1.00	8.37		S
ANISOU	967	SD	MET	115	1084	1088	1010	360	227	134	S
ATOM	968	CE	MET	115	0.087	0.065	-7.200	1.00	9.79		C
ANISOU	968	CE	MET	115	1170	1175	1374	186	-24	178	C
ATOM	969	C	MET	115	-3.834	-1.000	-9.956	1.00	7.49		C
ANISOU	969	C	MET	115	944	1054	848	121	163	75	C
ATOM	970	O	MET	115	-3.402	-1.795	-10.812	1.00	8.95		O
ANISOU	970	O	MET	115	1080	1362	959	258	111	-136	O
ATOM	971	N	GLU	116	-5.007	-0.427	-10.075	1.00	7.18		N
ANISOU	971	N	GLU	116	813	1062	854	3	225	62	N
ATOM	972	CA	GLU	116	-5.859	-0.651	-11.226	1.00	7.42		C
ANISOU	972	CA	GLU	116	857	1122	839	44	134	76	C
ATOM	973	CB	GLU	116	-7.229	0.004	-11.017	1.00	8.05		C
ANISOU	973	CB	GLU	116	797	1146	1116	35	129	0	C
ATOM	974	CG	GLU	116	-8.056	-0.557	-9.910	1.00	7.34		C
ANISOU	974	CG	GLU	116	892	1038	859	-20	56	-45	C
ATOM	975	CD	GLU	116	-8.828	-1.838	-10.171	1.00	7.31		C
ANISOU	975	CD	GLU	116	790	1129	858	24	52	-44	C
ATOM	976	OE1	GLU	116	-8.470	-2.569	-11.121	1.00	9.01		O
ANISOU	976	OE1	GLU	116	1236	1192	994	-54	-80	-149	O
ATOM	977	OE2	GLU	116	-9.723	-2.140	-9.371	1.00	8.65		O
ANISOU	977	OE2	GLU	116	859	1341	1087	-165	-5	156	O
ATOM	978	C	GLU	116	-5.271	-0.135	-12.510	1.00	8.41		C
ANISOU	978	C	GLU	116	925	1341	929	179	100	235	C
ATOM	979	O	GLU	116	-5.656	-0.642	-13.587	1.00	10.04		O
ANISOU	979	O	GLU	116	1295	1609	912	126	144	186	O
ATOM	980	N	ALA	117	-4.337	0.810	-12.423	1.00	8.97		N
ANISOU	980	N	ALA	117	795	1498	1116	58	104	418	N
ATOM	981	CA	ALA	117	-3.736	1.388	-13.617	1.00	11.15		C
ANISOU	981	CA	ALA	117	850	2078	1307	29	41	757	C
ATOM	982	CB	ALA	117	-3.165	2.741	-13.252	1.00	14.64		C
ANISOU	982	CB	ALA	117	1590	2122	1849	-422	27	918	C
ATOM	983	C	ALA	117	-2.645	0.508	-14.230	1.00	12.06		C
ANISOU	983	C	ALA	117	706	2723	1154	157	43	651	C
ATOM	984	O	ALA	117	-2.162	0.834	-15.284	1.00	16.79		O
ANISOU	984	O	ALA	117	1210	3737	1434	180	312	1088	O
ATOM	985	N	ARG	118	-2.285	-0.587	-13.554	1.00	12.17		N
ANISOU	985	N	ARG	118	999	2698	926	457	102	456	N
ATOM	986	CA	ARG	118	-1.248	-1.489	-14.070	1.00	14.36		C
ANISOU	986	CA	ARG	118	1361	3208	887	809	9	100	C
ATOM	987	CB	ARG	118	-0.723	-2.319	-12.885	1.00	14.01		C
ANISOU	987	CB	ARG	118	1203	3130	989	992	-40	-19	C
ATOM	988	CG	ARG	118	0.016	-1.416	-11.901	1.00	13.80		C
ANISOU	988	CG	ARG	118	1149	2987	1106	731	-94	161	C
ATOM	989	CD	ARG	118	0.646	-2.170	-10.704	1.00	12.50		C
ANISOU	989	CD	ARG	118	1228	2702	817	745	205	289	C
ATOM	990	NE	ARG	118	1.437	-3.272	-11.143	1.00	11.91		N
ANISOU	990	NE	ARG	118	848	2773	906	613	189	263	N
ATOM	991	CZ	ARG	118	2.687	-3.148	-11.565	1.00	11.79		C
ANISOU	991	CZ	ARG	118	999	2655	827	529	162	282	C
ATOM	992	NH1	ARG	118	3.332	-1.985	-11.591	1.00	13.33		N
ANISOU	992	NH1	ARG	118	1171	2713	1178	496	307	466	N
ATOM	993	NH2	ARG	118	3.334	-4.175	-12.017	1.00	13.68		N
ANISOU	993	NH2	ARG	118	862	3088	1247	545	70	-326	N
ATOM	994	C	ARG	118	-1.703	-2.366	-15.204	1.00	19.81		C
ANISOU	994	C	ARG	118	2318	3735	1476	1001	-543	-361	C
ATOM	995	O	ARG	118	-0.749	-2.899	-15.831	1.00	26.27		O

Forb. Fig. 3c

ANISOU	995	O	ARG	118	3598	5124	1261	1939	-413	-914	O
ATOM	996	OXT	ARG	118	-2.909	-2.522	-15.520	1.00	23.37		O
ANISOU	996	OXT	ARG	118	2783	2977	3119	783	-1533	-217	O
TER	997		ARG	118							
HETATM	998	O	HOH	1	3.784	0.363	6.059	1.00	6.35		O
ANISOU	998	O	HOH	1	618	1008	786	-85	46	43	O
HETATM	999	O	HOH	2	-5.940	-3.027	10.672	1.00	6.71		O
ANISOU	999	O	HOH	2	493	1007	1047	125	250	197	O
HETATM	1000	O	HOH	3	13.259	-3.428	15.251	1.00	7.97		O
ANISOU	1000	O	HOH	3	877	1123	1026	-163	243	-109	O
HETATM	1001	O	HOH	4	13.721	-1.526	17.159	1.00	8.71		O
ANISOU	1001	O	HOH	4	1234	1002	1075	148	170	-154	O
HETATM	1002	O	HOH	5	13.325	-2.530	2.119	1.00	9.30		O
ANISOU	1002	O	HOH	5	895	1501	1138	96	21	-197	O
HETATM	1003	O	HOH	6	-11.005	-4.203	13.990	1.00	7.91		O
ANISOU	1003	O	HOH	6	839	1225	943	130	101	-165	O
HETATM	1004	O	HOH	7	-8.814	8.595	-2.469	1.00	8.90		O
ANISOU	1004	O	HOH	7	996	975	1410	-98	138	351	O
HETATM	1005	O	HOH	8	19.911	2.123	10.571	1.00	9.76		O
ANISOU	1005	O	HOH	8	977	1184	1548	381	588	271	O
HETATM	1006	O	HOH	9	-18.239	-5.000	3.156	1.00	9.38		O
ANISOU	1006	O	HOH	9	646	1751	1168	-13	143	-473	O
HETATM	1007	O	HOH	10	7.128	-11.127	3.057	1.00	9.55		O
ANISOU	1007	O	HOH	10	1296	1225	1109	469	-182	-287	O
HETATM	1008	O	HOH	11	2.454	-9.389	-5.382	1.00	8.13		O
ANISOU	1008	O	HOH	11	862	1238	988	228	150	-53	O
HETATM	1009	O	HOH	12	-11.751	-3.402	-10.846	1.00	9.27		O
ANISOU	1009	O	HOH	12	1116	1260	1144	-199	-222	10	O
HETATM	1010	O	HOH	13	14.077	-2.998	19.463	1.00	9.29		O
ANISOU	1010	O	HOH	13	1387	1188	954	22	109	-83	O
HETATM	1011	O	HOH	14	18.819	12.180	15.874	1.00	10.22		O
ANISOU	1011	O	HOH	14	995	1298	1592	-228	99	331	O
HETATM	1012	O	HOH	15	15.941	0.064	16.600	1.00	10.23		O
ANISOU	1012	O	HOH	15	1024	1054	1808	197	37	-207	O
HETATM	1013	O	HOH	16	11.263	17.834	13.486	1.00	9.58		O
ANISOU	1013	O	HOH	16	1391	1099	1149	234	91	140	O
HETATM	1014	O	HOH	17	13.271	-2.264	21.961	1.00	9.77		O
ANISOU	1014	O	HOH	17	1056	1692	962	-305	80	-131	O
HETATM	1015	O	HOH	18	10.455	4.807	2.161	1.00	10.62		O
ANISOU	1015	O	HOH	18	1400	1253	1383	-364	84	289	O
HETATM	1016	O	HOH	19	-8.549	-9.209	7.381	1.00	10.90		O
ANISOU	1016	O	HOH	19	1498	907	1737	-113	273	-55	O
HETATM	1017	O	HOH	20	-14.477	-8.083	10.477	1.00	10.69		O
ANISOU	1017	O	HOH	20	1266	1070	1725	60	259	76	O
HETATM	1018	O	HOH	21	8.962	12.171	24.970	1.00	9.84		O
ANISOU	1018	O	HOH	21	1131	997	1611	-125	426	-72	O
HETATM	1019	O	HOH	22	7.419	10.449	26.608	1.00	9.07		O
ANISOU	1019	O	HOH	22	1188	928	1331	-212	309	-198	O
HETATM	1020	O	HOH	23	2.637	-8.403	19.811	1.00	9.28		O
ANISOU	1020	O	HOH	23	1291	1186	1050	4	194	37	O
HETATM	1021	O	HOH	24	-13.178	-4.395	-2.169	1.00	12.00		O
ANISOU	1021	O	HOH	24	907	2375	1276	-55	-132	451	O
HETATM	1022	O	HOH	25	3.541	2.220	-1.167	1.00	9.08		O
ANISOU	1022	O	HOH	25	1260	1025	1167	148	436	99	O
HETATM	1023	O	HOH	26	-15.882	-2.904	13.403	1.00	10.26		O
ANISOU	1023	O	HOH	26	1083	1144	1672	-223	528	-269	O
HETATM	1024	O	HOH	27	-10.589	3.126	-5.438	1.00	11.16		O
ANISOU	1024	O	HOH	27	935	1656	1649	-8	106	-38	O
HETATM	1025	O	HOH	28	9.181	-2.553	27.605	1.00	10.35		O
ANISOU	1025	O	HOH	28	1358	1498	1075	437	-288	-176	O
HETATM	1026	O	HOH	29	-10.542	-4.434	-8.150	1.00	10.62		O
ANISOU	1026	O	HOH	29	1456	1329	1250	-94	67	89	O
HETATM	1027	O	HOH	30	11.847	10.767	11.072	1.00	10.84		O
ANISOU	1027	O	HOH	30	1607	1505	1005	-117	29	-87	O
HETATM	1028	O	HOH	31	12.397	15.337	19.409	1.00	9.34		O
ANISOU	1028	O	HOH	31	1130	1069	1349	-134	338	-111	O
HETATM	1029	O	HOH	32	6.170	3.665	-4.109	1.00	12.03		O
ANISOU	1029	O	HOH	32	2023	1293	1254	-591	861	-113	O
HETATM	1030	O	HOH	33	-5.134	-8.190	3.989	1.00	12.45		O

Forb. Frg. 5c

ANISOU 1030	O	HOH	33	1040	1211	2479	-125	63	-68	O
HETATM 1031	O	HOH	34	15.848	10.186	19.323	1.00	12.19		O
ANISOU 1031	O	HOH	34	1634	1402	1593	-368	-59	62	O
HETATM 1032	O	HOH	35	-14.413	2.391	-2.188	1.00	11.82		O
ANISOU 1032	O	HOH	35	1177	2217	1096	-179	27	-129	O
HETATM 1033	O	HOH	36	9.130	-9.198	-0.475	1.00	10.98		O
ANISOU 1033	O	HOH	36	1211	1152	1808	-70	53	-109	O
HETATM 1034	O	HOH	37	11.718	-2.428	-2.481	1.00	10.71		O
ANISOU 1034	O	HOH	37	767	2098	1204	318	175	14	O
HETATM 1035	O	HOH	38	10.242	-6.248	13.616	1.00	13.95		O
ANISOU 1035	O	HOH	38	1303	1556	2443	-316	-331	622	O
HETATM 1036	O	HOH	39	18.225	5.981	13.159	1.00	10.80		O
ANISOU 1036	O	HOH	39	1239	1122	1744	-289	738	-41	O
HETATM 1037	O	HOH	40	-14.443	5.707	6.374	1.00	10.86		O
ANISOU 1037	O	HOH	40	994	1124	2007	-97	-80	-296	O
HETATM 1038	O	HOH	41	2.143	3.233	-6.271	1.00	14.00		O
ANISOU 1038	O	HOH	41	1542	1950	1827	604	581	821	O
HETATM 1039	O	HOH	42	14.968	-1.515	11.010	1.00	11.92		O
ANISOU 1039	O	HOH	42	813	1403	2313	160	342	776	O
HETATM 1040	O	HOH	43	-5.647	5.158	6.072	1.00	11.77		O
ANISOU 1040	O	HOH	43	929	1670	1871	-355	-216	554	O
HETATM 1041	O	HOH	44	0.505	-10.698	0.851	1.00	11.20		O
ANISOU 1041	O	HOH	44	1220	1790	1247	-57	-22	-86	O
HETATM 1042	O	HOH	45	2.290	10.432	21.368	1.00	11.51		O
ANISOU 1042	O	HOH	45	1346	1435	1591	-37	90	-64	O
HETATM 1043	O	HOH	46	6.351	-11.732	5.644	1.00	11.12		O
ANISOU 1043	O	HOH	46	1393	1297	1536	24	271	-181	O
HETATM 1044	O	HOH	47	15.995	-2.741	9.026	1.00	11.15		O
ANISOU 1044	O	HOH	47	1272	1828	1138	-192	-62	249	O
HETATM 1045	O	HOH	48	-7.684	-9.792	9.971	1.00	10.73		O
ANISOU 1045	O	HOH	48	1405	1042	1629	-220	491	-109	O
HETATM 1046	O	HOH	49	13.215	-5.027	17.662	1.00	10.61		O
ANISOU 1046	O	HOH	49	1752	1135	1144	-263	123	-11	O
HETATM 1047	O	HOH	50	0.456	3.317	5.166	1.00	13.56		O
ANISOU 1047	O	HOH	50	1932	1383	1839	-380	-340	330	O
HETATM 1048	O	HOH	51	7.580	-6.442	-9.150	1.00	12.07		O
ANISOU 1048	O	HOH	51	1668	1846	1073	-135	604	-355	O
HETATM 1049	O	HOH	52	3.051	-7.993	-8.574	1.00	12.91		O
ANISOU 1049	O	HOH	52	1605	1774	1528	174	534	-356	O
HETATM 1050	O	HOH	53	16.956	7.311	11.052	1.00	10.04		O
ANISOU 1050	O	HOH	53	1237	1321	1258	-68	605	-174	O
HETATM 1051	O	HOH	54	-7.821	-2.324	-13.725	1.00	12.10		O
ANISOU 1051	O	HOH	54	1654	2002	942	-134	-77	-11	O
HETATM 1052	O	HOH	55	6.149	6.025	6.604	1.00	15.08		O
ANISOU 1052	O	HOH	55	1846	1572	2311	143	-591	355	O
HETATM 1053	O	HOH	56	3.959	-0.838	32.409	1.00	11.62		O
ANISOU 1053	O	HOH	56	1215	1918	1282	-336	143	-75	O
HETATM 1054	O	HOH	57	2.384	10.314	26.983	1.00	12.90		O
ANISOU 1054	O	HOH	57	1952	1109	1841	134	714	-21	O
HETATM 1055	O	HOH	58	-8.829	3.609	9.383	1.00	11.06		O
ANISOU 1055	O	HOH	58	1158	1560	1483	315	-41	-481	O
HETATM 1056	O	HOH	59	1.711	8.985	23.564	1.00	11.96		O
ANISOU 1056	O	HOH	59	1305	1509	1732	23	88	230	O
HETATM 1057	O	HOH	60	-1.620	3.078	1.423	1.00	12.18		O
ANISOU 1057	O	HOH	60	1377	1930	1320	-255	54	-68	O
HETATM 1058	O	HOH	61	-5.683	-4.467	19.147	1.00	14.82		O
ANISOU 1058	O	HOH	61	1113	2853	1666	40	81	-414	O
HETATM 1059	O	HOH	62	-7.085	-11.947	12.962	1.00	12.22		O
ANISOU 1059	O	HOH	62	1457	1266	1920	-425	298	-18	O
HETATM 1060	O	HOH	63	7.509	3.991	29.853	1.00	13.92		O
ANISOU 1060	O	HOH	63	1588	2427	1273	-288	-69	-256	O
HETATM 1061	O	HOH	64	8.063	15.335	18.490	1.00	14.35		O
ANISOU 1061	O	HOH	64	1746	2162	1546	-21	190	-166	O
HETATM 1062	O	HOH	65	12.829	10.087	22.249	1.00	16.35		O
ANISOU 1062	O	HOH	65	1643	2652	1917	-1020	-138	-230	O
HETATM 1063	O	HOH	66	11.937	-0.047	28.447	1.00	13.24		O
ANISOU 1063	O	HOH	66	1250	1865	1916	93	-149	-645	O
HETATM 1064	O	HOH	67	18.481	10.927	18.424	1.00	15.10		O
ANISOU 1064	O	HOH	67	2422	1543	1773	-734	-652	168	O

Forb. Fig. 3c

HETATM	1065	O	HOH	68	1.708	8.765	29.229	1.00	14.06		O
ANISOU	1065	O	HOH	68	2297	1061	1986	181	748	200	O
HETATM	1066	O	HOH	69	-4.335	-8.626	-7.350	1.00	13.27		O
ANISOU	1066	O	HOH	69	1416	1779	1847	-235	-125	-101	O
HETATM	1067	O	HOH	70	-1.785	-6.358	25.816	1.00	12.89		O
ANISOU	1067	O	HOH	70	1155	2145	1599	-68	49	-218	O
HETATM	1068	O	HOH	71	-12.587	4.283	9.819	1.00	13.48		O
ANISOU	1068	O	HOH	71	1991	1649	1483	572	687	123	O
HETATM	1069	O	HOH	72	12.503	-8.113	29.263	1.00	16.04		O
ANISOU	1069	O	HOH	72	2832	1435	1825	147	-237	-184	O
HETATM	1070	O	HOH	73	5.131	-7.832	13.363	1.00	15.68		O
ANISOU	1070	O	HOH	73	3047	1171	1738	-598	-148	30	O
HETATM	1071	O	HOH	74	4.453	16.015	21.455	1.00	16.79		O
ANISOU	1071	O	HOH	74	2694	2011	1675	845	969	223	O
HETATM	1072	O	HOH	75	0.016	2.925	-4.510	1.00	17.24		O
ANISOU	1072	O	HOH	75	1617	3252	1681	779	392	780	O
HETATM	1073	O	HOH	76	0.808	2.369	-2.043	1.00	17.21		O
ANISOU	1073	O	HOH	76	1309	3366	1864	554	638	986	O
HETATM	1074	O	HOH	77	-6.020	-11.800	10.307	1.00	18.27		O
ANISOU	1074	O	HOH	77	3741	1525	1677	1234	-332	-365	O
HETATM	1075	O	HOH	78	4.689	-8.799	25.371	1.00	14.05		O
ANISOU	1075	O	HOH	78	2109	1443	1787	312	682	28	O
HETATM	1076	O	HOH	79	16.696	-0.791	14.028	1.00	12.96		O
ANISOU	1076	O	HOH	79	1367	1520	2038	-128	261	-266	O
HETATM	1077	O	HOH	80	10.743	-9.148	1.673	1.00	11.13		O
ANISOU	1077	O	HOH	80	1222	1684	1323	-9	-51	-183	O
HETATM	1078	O	HOH	81	16.479	9.200	9.098	1.00	16.88		O
ANISOU	1078	O	HOH	81	2956	1901	1558	-597	5	389	O
HETATM	1079	O	HOH	82	-7.791	-10.115	16.687	1.00	17.89		O
ANISOU	1079	O	HOH	82	2119	2548	2129	-1043	-220	995	O
HETATM	1080	O	HOH	83	14.019	10.987	9.487	1.00	16.90		O
ANISOU	1080	O	HOH	83	2253	2476	1692	-940	685	-491	O
HETATM	1081	O	HOH	84	-10.428	7.063	6.417	1.00	18.28		O
ANISOU	1081	O	HOH	84	2044	2410	2493	-182	220	198	O
HETATM	1082	O	HOH	85	4.415	-9.244	-7.235	1.00	24.18		O
ANISOU	1082	O	HOH	85	2070	2814	4302	68	890	-1550	O
HETATM	1083	O	HOH	86	-11.159	9.895	-1.685	1.00	15.75		O
ANISOU	1083	O	HOH	86	1979	1548	2458	-148	170	47	O
HETATM	1084	O	HOH	87	-2.525	-9.631	7.844	1.00	15.89		O
ANISOU	1084	O	HOH	87	1851	2020	2167	-215	-220	231	O
HETATM	1085	O	HOH	88	-2.842	7.518	-0.226	1.00	14.98		O
ANISOU	1085	O	HOH	88	1914	2135	1644	-255	163	76	O
HETATM	1086	O	HOH	89	8.062	-6.177	11.789	1.00	13.76		O
ANISOU	1086	O	HOH	89	1322	1852	2053	-378	176	-181	O
HETATM	1087	O	HOH	90	9.410	-7.377	15.860	1.00	13.92		O
ANISOU	1087	O	HOH	90	1592	1497	2201	227	149	630	O
HETATM	1088	O	HOH	91	-1.392	7.662	19.014	1.00	23.72		O
ANISOU	1088	O	HOH	91	3166	2792	3054	1339	-461	56	O
HETATM	1089	O	HOH	92	-6.817	10.863	5.952	1.00	21.26		O
ANISOU	1089	O	HOH	92	3667	2094	2318	600	1680	297	O
HETATM	1090	O	HOH	93	-7.148	-6.664	18.994	1.00	20.53		O
ANISOU	1090	O	HOH	93	2655	3812	1334	-564	36	-231	O
HETATM	1091	O	HOH	94	5.574	6.154	12.928	1.00	19.83		O
ANISOU	1091	O	HOH	94	2373	1114	4047	-594	-411	-105	O
HETATM	1092	O	HOH	95	13.968	-5.609	25.078	1.00	20.86		O
ANISOU	1092	O	HOH	95	1638	3356	2929	144	88	-215	O
HETATM	1093	O	HOH	96	-1.284	3.769	22.619	1.00	17.86		O
ANISOU	1093	O	HOH	96	2326	2224	2236	508	-584	-485	O
HETATM	1094	O	HOH	97	6.940	12.434	15.283	1.00	17.52		O
ANISOU	1094	O	HOH	97	2060	2536	2060	353	91	131	O
HETATM	1095	O	HOH	98	-17.688	-3.047	-0.611	1.00	20.47		O
ANISOU	1095	O	HOH	98	2604	3851	1323	1707	-32	-488	O
HETATM	1096	O	HOH	99	-4.576	-4.038	-11.796	1.00	14.84		O
ANISOU	1096	O	HOH	99	2151	1684	1801	-46	192	-213	O
HETATM	1097	O	HOH	100	20.550	0.808	14.949	1.00	18.96		O
ANISOU	1097	O	HOH	100	1894	2117	3192	-45	63	121	O
HETATM	1098	O	HOH	101	-8.010	8.001	6.405	1.00	17.17		O
ANISOU	1098	O	HOH	101	2156	2068	2299	-96	663	237	O
HETATM	1099	O	HOH	102	3.241	-11.418	23.042	1.00	21.24		O

Forb. Fig. 3c

ANISOU	1099	O	HOH	102	2745	2190	3136	83	797	593	O
HETATM	1100	O	HOH	103	2.479	14.044	20.345	1.00	20.58		O
ANISOU	1100	O	HOH	103	1796	3507	2517	841	645	1076	O
HETATM	1101	O	HOH	104	12.014	-5.706	-5.507	1.00	19.66		O
ANISOU	1101	O	HOH	104	1503	2998	2969	865	725	567	O
HETATM	1102	O	HOH	105	0.034	-5.591	-11.293	1.00	19.72		O
ANISOU	1102	O	HOH	105	1780	2944	2767	123	474	213	O
HETATM	1103	O	HOH	106	4.192	-11.057	7.101	1.00	25.13		O
ANISOU	1103	O	HOH	106	2398	5057	2095	1131	740	1411	O
HETATM	1104	O	HOH	107	1.254	8.033	17.792	1.00	18.33		O
ANISOU	1104	O	HOH	107	2955	1996	2012	639	983	-356	O
HETATM	1105	O	HOH	108	7.246	10.330	10.390	1.00	19.86		O
ANISOU	1105	O	HOH	108	1929	2324	3292	-12	490	440	O
HETATM	1106	O	HOH	109	13.557	4.026	25.354	1.00	24.46		O
ANISOU	1106	O	HOH	109	4789	2539	1964	-360	237	-129	O
HETATM	1107	O	HOH	110	-2.469	4.880	-0.744	1.00	20.47		O
ANISOU	1107	O	HOH	110	1302	3381	3093	326	-644	-308	O
HETATM	1108	O	HOH	111	3.201	-10.101	11.469	1.00	20.91		O
ANISOU	1108	O	HOH	111	3292	1186	3466	351	810	690	O
HETATM	1109	O	HOH	112	14.430	11.932	21.047	1.00	18.19		O
ANISOU	1109	O	HOH	112	2540	1570	2801	-669	965	-721	O
HETATM	1110	O	HOH	113	-6.297	4.036	-12.191	1.00	19.52		O
ANISOU	1110	O	HOH	113	3310	2424	1685	681	-992	-336	O
HETATM	1111	O	HOH	114	7.529	-9.304	12.760	1.00	23.68		O
ANISOU	1111	O	HOH	114	2251	2638	4109	273	-493	-257	O
HETATM	1112	O	HOH	115	-4.042	0.716	19.924	1.00	18.32		O
ANISOU	1112	O	HOH	115	2004	2758	2198	53	605	83	O
HETATM	1113	O	HOH	116	14.118	-6.639	6.023	1.00	33.01		O
ANISOU	1113	O	HOH	116	2274	4956	5312	1543	-1391	-1435	O
HETATM	1114	O	HOH	117	-2.346	8.188	22.967	1.00	19.86		O
ANISOU	1114	O	HOH	117	2449	2286	2810	517	-50	-996	O
HETATM	1115	O	HOH	118	2.422	-7.018	-11.302	1.00	23.85		O
ANISOU	1115	O	HOH	118	2676	3268	3119	-388	732	-936	O
HETATM	1116	O	HOH	119	-1.154	8.296	28.859	1.00	18.14		O
ANISOU	1116	O	HOH	119	2735	2070	2085	715	477	890	O
HETATM	1117	O	HOH	120	-1.979	8.521	-6.607	1.00	19.92		O
ANISOU	1117	O	HOH	120	3291	2180	2096	-711	1382	-325	O
HETATM	1118	O	HOH	121	13.166	2.441	29.298	1.00	15.94		O
ANISOU	1118	O	HOH	121	1579	2335	2142	-241	-26	-779	O
HETATM	1119	O	HOH	122	11.218	-8.169	12.058	1.00	22.91		O
ANISOU	1119	O	HOH	122	2978	3999	1729	-1080	82	810	O
HETATM	1120	O	HOH	123	-5.919	-9.222	1.448	1.00	29.63		O
ANISOU	1120	O	HOH	123	6180	2886	2193	-468	-547	690	O
HETATM	1121	O	HOH	124	5.116	-8.835	16.037	1.00	23.53		O
ANISOU	1121	O	HOH	124	4310	2094	2535	1161	1182	68	O
HETATM	1122	O	HOH	125	-5.005	-0.944	-16.365	1.00	25.74		O
ANISOU	1122	O	HOH	125	2632	5343	1807	790	444	-818	O
HETATM	1123	O	HOH	126	4.469	7.822	14.522	1.00	26.15		O
ANISOU	1123	O	HOH	126	2822	4875	2238	-981	-117	1080	O
HETATM	1124	O	HOH	127	-8.956	7.538	-5.010	1.00	22.44		O
ANISOU	1124	O	HOH	127	5265	1580	1681	183	-234	118	O
HETATM	1125	O	HOH	128	6.143	13.726	19.338	1.00	21.60		O
ANISOU	1125	O	HOH	128	3214	2436	2558	-716	230	435	O
HETATM	1126	O	HOH	129	-10.923	4.794	-9.410	1.00	28.43		O
ANISOU	1126	O	HOH	129	3555	3821	3426	-1579	-1112	1892	O
HETATM	1127	O	HOH	130	-4.539	7.051	-8.164	1.00	35.11		O
ANISOU	1127	O	HOH	130	4430	2793	6116	1614	-2815	-1383	O
HETATM	1128	O	HOH	131	19.864	5.177	16.920	1.00	32.12		O
ANISOU	1128	O	HOH	131	4103	3720	4380	2165	-1458	-1908	O
HETATM	1129	O	HOH	132	17.787	11.332	9.619	1.00	42.07		O
ANISOU	1129	O	HOH	132	6724	4843	4418	386	880	-2382	O
HETATM	1130	O	HOH	133	4.942	11.522	27.359	1.00	11.01		O
ANISOU	1130	O	HOH	133	1771	910	1500	190	642	8	O
HETATM	1131	O	HOH	134	-12.879	1.854	-4.448	1.00	12.67		O
ANISOU	1131	O	HOH	134	1108	2151	1554	-172	14	63	O
HETATM	1132	O	HOH	135	-18.091	-7.252	1.598	1.00	13.79		O
ANISOU	1132	O	HOH	135	1299	2072	1868	487	-56	-603	O
HETATM	1133	O	HOH	136	9.587	-0.612	29.538	1.00	11.18		O
ANISOU	1133	O	HOH	136	1113	1886	1250	-79	-21	-206	O

Forb. Fig. 3c

HETATM	1134	O	HOH	137	8.386	1.562	30.842	1.00	13.31		O
ANISOU	1134	O	HOH	137	1420	2259	1380	-122	167	-296	O
HETATM	1135	O	HOH	138	-6.792	-9.847	5.429	1.00	14.57		O
ANISOU	1135	O	HOH	138	2143	1315	2079	-9	672	2	O
HETATM	1136	O	HOH	139	-15.030	8.255	6.469	1.00	14.67		O
ANISOU	1136	O	HOH	139	2391	1013	2169	22	736	-76	O
HETATM	1137	O	HOH	140	3.068	2.970	5.473	1.00	17.91		O
ANISOU	1137	O	HOH	140	2508	1187	3110	138	-207	444	O
HETATM	1138	O	HOH	141	1.271	4.005	-8.715	1.00	15.90		O
ANISOU	1138	O	HOH	141	1352	2484	2206	344	162	551	O
HETATM	1139	O	HOH	142	-0.518	-9.851	20.204	1.00	17.11		O
ANISOU	1139	O	HOH	142	2750	1780	1970	-206	-199	100	O
HETATM	1140	O	HOH	143	-15.730	-4.089	-1.759	1.00	19.63		O
ANISOU	1140	O	HOH	143	1329	4347	1783	981	328	612	O
HETATM	1141	O	HOH	144	-12.083	-3.233	-4.176	1.00	16.83		O
ANISOU	1141	O	HOH	144	1818	2680	1897	-414	-158	636	O
HETATM	1142	O	HOH	145	-17.563	-6.129	-1.090	1.00	19.39		O
ANISOU	1142	O	HOH	145	3249	2176	1942	-92	-15	-599	O
HETATM	1143	O	HOH	146	14.882	-3.908	-4.652	1.00	26.49		O
ANISOU	1143	O	HOH	146	2756	5101	2210	1749	-714	441	O
HETATM	1144	O	HOH	147	9.825	-8.071	-3.041	1.00	16.59		O
ANISOU	1144	O	HOH	147	2026	2017	2261	291	448	611	O
HETATM	1145	O	HOH	148	11.608	-10.323	12.801	1.00	21.88		O
ANISOU	1145	O	HOH	148	1893	4124	2296	684	540	58	O
HETATM	1146	O	HOH	149	-2.964	5.318	5.921	1.00	20.63		O
ANISOU	1146	O	HOH	149	1264	2385	4191	133	26	280	O
HETATM	1147	O	HOH	150	-3.802	-8.060	-9.893	1.00	21.45		O
ANISOU	1147	O	HOH	150	2971	3343	1836	679	-214	-495	O
HETATM	1148	O	HOH	151	-15.581	-0.142	-2.337	1.00	22.68		O
ANISOU	1148	O	HOH	151	3462	3062	2093	-1404	-116	-388	O
HETATM	1149	O	HOH	152	7.152	7.458	10.557	1.00	23.58		O
ANISOU	1149	O	HOH	152	3640	1863	3457	-118	-711	-580	O
HETATM	1150	O	HOH	153	-7.045	-8.529	-7.287	1.00	20.70		O
ANISOU	1150	O	HOH	153	2515	2601	2750	709	345	-1066	O
HETATM	1151	O	HOH	154	11.666	-5.127	-2.791	1.00	24.90		O
ANISOU	1151	O	HOH	154	2123	3261	4074	883	-550	362	O
HETATM	1152	O	HOH	155	-11.667	-1.570	14.458	1.00	19.77		O
ANISOU	1152	O	HOH	155	1603	1727	4183	425	-168	-552	O
HETATM	1153	O	HOH	156	6.885	5.427	32.060	1.00	26.07		O
ANISOU	1153	O	HOH	156	4414	2371	3123	-231	-605	-839	O
HETATM	1154	O	HOH	157	-0.431	4.721	13.154	1.00	27.18		O
ANISOU	1154	O	HOH	157	4283	1995	4047	598	-1966	-270	O
HETATM	1155	O	HOH	158	10.219	-4.280	29.995	1.00	38.60		O
ANISOU	1155	O	HOH	158	2815	7308	4542	-977	2307	95	O
HETATM	1156	O	HOH	159	2.405	10.801	30.754	1.00	26.06		O
ANISOU	1156	O	HOH	159	4296	1878	3728	-703	997	-453	O
HETATM	1157	O	HOH	160	13.658	8.386	5.236	1.00	23.60		O
ANISOU	1157	O	HOH	160	3321	2143	3502	-853	1020	-38	O
HETATM	1158	O	HOH	161	9.668	5.656	29.269	1.00	24.48		O
ANISOU	1158	O	HOH	161	2694	2457	4150	-566	-824	-131	O
HETATM	1159	O	HOH	162	0.380	2.373	-10.802	1.00	23.72		O
ANISOU	1159	O	HOH	162	1989	5142	1881	-1370	452	51	O
HETATM	1160	O	HOH	163	17.865	4.266	21.005	1.00	21.42		O
ANISOU	1160	O	HOH	163	2271	2302	3566	-313	-155	918	O
HETATM	1161	O	HOH	164	-15.733	7.620	-0.835	1.00	21.47		O
ANISOU	1161	O	HOH	164	2183	3530	2444	609	875	1092	O
HETATM	1162	O	HOH	165	-14.324	-8.960	4.330	1.00	23.64		O
ANISOU	1162	O	HOH	165	2649	3576	2757	-709	-494	1179	O
HETATM	1163	O	HOH	166	6.565	0.008	32.412	1.00	25.15		O
ANISOU	1163	O	HOH	166	1899	6267	1388	-1774	11	229	O
HETATM	1164	O	HOH	167	5.825	5.929	-2.522	1.00	25.72		O
ANISOU	1164	O	HOH	167	4125	2343	3305	-923	975	212	O
HETATM	1165	O	HOH	168	14.798	5.861	23.694	1.00	27.89		O
ANISOU	1165	O	HOH	168	5221	2345	3032	9	-933	-635	O
HETATM	1166	O	HOH	169	13.493	12.447	7.336	1.00	27.51		O
ANISOU	1166	O	HOH	169	4535	3753	2165	-945	521	721	O
HETATM	1167	O	HOH	170	-0.564	7.798	1.372	1.00	22.16		O
ANISOU	1167	O	HOH	170	2351	2235	3835	449	-649	-335	O
HETATM	1168	O	HOH	171	-9.082	12.043	5.652	1.00	32.67		O

Forb. Fig. 3c

ANISOU 1168	O	HOH 171	4519	2778	5118	1260	1590	-655	O
HETATM 1169	O	HOH 172	1.804	-3.199	-15.158	1.00	24.99		O
ANISOU 1169	O	HOH 172	2783	5229	1484	723	595	55	O
HETATM 1170	O	HOH 173	-12.688	8.900	0.467	1.00	22.45		O
ANISOU 1170	O	HOH 173	2890	2532	3109	481	259	1003	O
HETATM 1171	O	HOH 174	9.210	6.759	0.685	1.00	21.27		O
ANISOU 1171	O	HOH 174	3660	1564	2858	329	-524	-93	O
HETATM 1172	O	HOH 175	16.732	-3.092	19.552	1.00	25.36		O
ANISOU 1172	O	HOH 175	1382	4476	3779	790	342	-374	O
HETATM 1173	O	HOH 176	-12.903	10.600	-3.910	1.00	32.18		O
ANISOU 1173	O	HOH 176	4230	3442	4554	317	-1059	524	O
HETATM 1174	O	HOH 177	-6.990	5.936	8.312	1.00	22.91		O
ANISOU 1174	O	HOH 177	1985	4037	2683	144	43	695	O
HETATM 1175	O	HOH 178	-2.557	-10.631	16.426	1.00	25.48		O
ANISOU 1175	O	HOH 178	2550	2810	4321	-846	-29	775	O
HETATM 1176	O	HOH 179	-11.795	5.632	-5.618	1.00	24.16		O
ANISOU 1176	O	HOH 179	3415	2511	3254	1318	-960	96	O
HETATM 1177	O	HOH 180	3.552	-13.989	24.298	1.00	38.36		O
ANISOU 1177	O	HOH 180	3069	3874	7631	2483	962	-1204	O
HETATM 1178	O	HOH 181	7.601	-1.782	33.358	1.00	24.95		O
ANISOU 1178	O	HOH 181	2047	3242	4192	31	396	163	O
HETATM 1179	O	HOH 182	3.513	16.223	19.101	1.00	36.86		O
ANISOU 1179	O	HOH 182	4292	4813	4901	-1066	1944	-49	O
HETATM 1180	O	HOH 183	14.453	8.251	22.911	1.00	27.11		O
ANISOU 1180	O	HOH 183	2966	4756	2577	1109	116	-352	O
HETATM 1181	O	HOH 184	12.281	-9.071	8.514	1.00	29.42		O
ANISOU 1181	O	HOH 184	3911	3473	3793	2082	-2337	-2095	O
HETATM 1182	O	HOH 185	-12.859	-6.463	-4.199	1.00	29.25		O
ANISOU 1182	O	HOH 185	3858	3917	3338	1220	-1859	-268	O
HETATM 1183	O	HOH 186	-4.333	5.608	25.100	1.00	33.62		O
ANISOU 1183	O	HOH 186	1887	4974	5911	-97	-407	-1198	O
HETATM 1184	O	HOH 187	3.364	-10.873	25.801	1.00	25.39		O
ANISOU 1184	O	HOH 187	3541	2383	3721	127	844	-93	O
HETATM 1185	O	HOH 188	-16.223	4.715	-2.624	1.00	30.16		O
ANISOU 1185	O	HOH 188	3490	4533	3435	-187	-1132	-1066	O
HETATM 1186	O	HOH 189	-2.001	-9.709	-0.169	1.00	23.21		O
ANISOU 1186	O	HOH 189	2687	3255	2878	-281	-4	-328	O
HETATM 1187	O	HOH 190	5.856	8.024	7.872	1.00	27.00		O
ANISOU 1187	O	HOH 190	4002	3254	3002	500	-869	-520	O
HETATM 1188	O	HOH 191	9.082	10.663	28.824	1.00	28.87		O
ANISOU 1188	O	HOH 191	3144	4591	3235	-406	-1687	-494	O
HETATM 1189	O	HOH 192	-7.885	2.975	16.766	1.00	45.97		O
ANISOU 1189	O	HOH 192	4955	5315	7198	3404	-371	-2022	O
HETATM 1190	O	HOH 193	0.692	-11.107	11.839	1.00	35.08		O
ANISOU 1190	O	HOH 193	4529	2818	5983	-1176	-1566	1705	O
HETATM 1191	O	HOH 194	-4.300	6.992	22.865	1.00	29.14		O
ANISOU 1191	O	HOH 194	4750	2456	3868	325	-484	-340	O
HETATM 1192	O	HOH 195	15.728	-5.086	22.814	1.00	32.52		O
ANISOU 1192	O	HOH 195	3740	2628	5988	930	-1653	-1867	O
HETATM 1193	O	HOH 196	20.386	6.775	19.504	1.00	43.63		O
ANISOU 1193	O	HOH 196	4155	6404	6019	1289	-946	2596	O
HETATM 1194	O	HOH 197	-9.391	-9.587	-3.877	1.00	28.59		O
ANISOU 1194	O	HOH 197	2809	3149	4904	-1518	-834	1732	O
HETATM 1195	O	HOH 198	3.767	4.964	-0.936	1.00	25.02		O
ANISOU 1195	O	HOH 198	3526	1999	3980	-133	28	-200	O
HETATM 1196	O	HOH 199	-2.379	-11.365	3.345	1.00	26.87		O
ANISOU 1196	O	HOH 199	2423	2967	4819	-81	87	-863	O
HETATM 1197	O	HOH 200	9.869	-0.816	32.221	1.00	18.11		O
ANISOU 1197	O	HOH 200	1972	2401	2507	-301	502	132	O
HETATM 1198	O	HOH 201	-14.357	12.901	-3.152	1.00	40.85		O
ANISOU 1198	O	HOH 201	4937	4571	6012	250	-1450	-2961	O
HETATM 1199	O	HOH 202	2.167	0.560	-11.530	1.00	31.25		O
ANISOU 1199	O	HOH 202	3159	3858	4856	-27	-1018	-727	O
HETATM 1200	O	HOH 203	5.505	18.527	19.968	1.00	58.59		O
ANISOU 1200	O	HOH 203	8121	7377	6763	-1954	-709	-1292	O
HETATM 1201	O	HOH 204	-15.490	8.935	-3.643	1.00	35.15		O
ANISOU 1201	O	HOH 204	6401	3551	3402	391	-2583	-476	O
HETATM 1202	O	HOH 205	15.636	13.968	6.965	1.00	22.84		O
ANISOU 1202	O	HOH 205	2322	3816	2541	692	364	254	O

44/137

Forb. Fig. 3c

HETATM 1203	O	HOH 206	1.235	6.251	0.013	1.00	43.84	
ANISOU 1203	O	HOH 206	4377	4896	7382	2301	-569	-850
HETATM 1204	O	HOH 207	8.636	-5.712	31.036	1.00	28.69	
ANISOU 1204	O	HOH 207	3588	4724	2587	-788	-662	1218
HETATM 1205	O	HOH 208	18.630	3.120	18.327	1.00	35.96	
ANISOU 1205	O	HOH 208	4043	4134	5486	1780	-2758	-1112
HETATM 1206	O	HOH 209	-0.510	7.029	15.110	1.00	35.55	
ANISOU 1206	O	HOH 209	4052	3884	5571	1618	-1607	-448
HETATM 1207	O	HOH 210	-2.521	2.657	-17.194	1.00	29.17	
ANISOU 1207	O	HOH 210	4885	3473	2726	271	-263	1139
HETATM 1208	O	HOH 211	-2.842	5.537	14.668	1.00	37.10	
ANISOU 1208	O	HOH 211	5777	5580	2738	-281	-869	93
HETATM 1209	O	HOH 212	3.738	5.323	-5.383	1.00	30.38	
ANISOU 1209	O	HOH 212	4846	3170	3527	201	1439	-490
HETATM 1210	O	HOH 213	-1.666	-5.222	-9.809	1.00	32.31	
ANISOU 1210	O	HOH 213	4309	4155	3811	-1119	-1032	1120
HETATM 1211	O	HOH 214	1.135	-6.763	-14.792	1.00	43.82	
ANISOU 1211	O	HOH 214	3797	6758	6095	-1911	-453	835
HETATM 1212	O	HOH 215	0.302	1.556	-15.759	1.00	29.96	
ANISOU 1212	O	HOH 215	2700	4386	4298	52	104	443
HETATM 1213	O	HOH 216	-10.565	-8.900	-0.391	1.00	39.09	
ANISOU 1213	O	HOH 216	3204	5155	6493	503	1672	-1786
HETATM 1214	O	HOH 217	-11.303	10.172	5.940	1.00	32.24	
ANISOU 1214	O	HOH 217	5093	4934	2223	-600	373	-717
HETATM 1215	O	HOH 218	1.469	-10.819	27.759	1.00	39.84	
ANISOU 1215	O	HOH 218	4783	5211	5142	-822	2482	1168
HETATM 1216	O	HOH 219	-18.132	5.135	-1.460	1.00	37.77	
ANISOU 1216	O	HOH 219	4419	7414	2517	175	444	-1101
HETATM 1217	O	HOH 220	-7.198	-11.551	3.582	1.00	39.30	
ANISOU 1217	O	HOH 220	6294	4645	3993	-415	1143	-1015
HETATM 1218	O	HOH 221	4.352	4.822	4.347	1.00	39.19	
ANISOU 1218	O	HOH 221	5188	4289	5412	-520	-60	2284
HETATM 1219	O	HOH 222	-4.748	-11.053	6.515	1.00	32.61	
ANISOU 1219	O	HOH 222	4427	3460	4504	1037	607	-396
HETATM 1220	O	HOH 223	4.490	12.052	29.901	1.00	29.86	
ANISOU 1220	O	HOH 223	7483	1827	2036	-702	261	-222
HETATM 1221	O	HOH 224	3.658	5.097	6.844	1.00	33.52	
ANISOU 1221	O	HOH 224	2495	5114	5129	-49	700	-881
HETATM 1222	O	HOH 225	1.358	-8.599	28.679	1.00	35.10	
ANISOU 1222	O	HOH 225	4944	2960	5432	1544	1767	149
HETATM 1223	O	HOH 226	-7.398	-7.834	-9.881	1.00	41.67	
ANISOU 1223	O	HOH 226	7392	2526	5914	-171	-3836	-1023
HETATM 1224	O	HOH 227	-3.170	-12.856	22.443	1.00	40.16	
ANISOU 1224	O	HOH 227	5753	3037	6470	-91	-227	230
HETATM 1225	O	HOH 228	-10.014	4.337	14.182	1.00	31.95	
ANISOU 1225	O	HOH 228	1939	3837	6365	246	158	-1526
HETATM 1226	O	HOH 229	-6.450	3.243	24.153	1.00	39.72	
ANISOU 1226	O	HOH 229	6060	4354	4677	-527	1775	710
HETATM 1227	O	HOH 230	-3.270	6.757	29.605	1.00	32.77	
ANISOU 1227	O	HOH 230	4413	3227	4810	553	-964	1580
HETATM 1228	O	HOH 231	-4.861	6.012	27.737	1.00	51.18	
ANISOU 1228	O	HOH 231	7570	5930	5945	-1949	-805	1544
HETATM 1229	O	HOH 232	-2.372	-12.816	-1.016	1.00	41.42	
ANISOU 1229	O	HOH 232	3979	5175	6582	11	-71	-171
HETATM 1230	O	HOH 233	1.653	3.040	-17.454	1.00	35.07	
ANISOU 1230	O	HOH 233	3902	5724	3699	-376	2238	-1516
HETATM 1231	O	HOH 234	-0.966	7.881	4.717	1.00	40.53	
ANISOU 1231	O	HOH 234	5707	3759	5934	-285	-1829	-541
HETATM 1232	O	HOH 235	2.345	6.587	11.965	1.00	32.43	
ANISOU 1232	O	HOH 235	4730	4097	3496	1792	615	211
HETATM 1233	O	HOH 236	0.447	-13.953	-11.262	1.00	42.94	
ANISOU 1233	O	HOH 236	6460	2328	7529	-2016	-752	-445
HETATM 1234	O	HOH 237	-15.417	-10.705	0.764	1.00	33.16	
ANISOU 1234	O	HOH 237	5023	4239	3336	-1637	1753	-131
HETATM 1235	O	HOH 238	1.856	2.655	33.225	1.00	24.76	
ANISOU 1235	O	HOH 238	6301	2161	944	-1729	519	382
HETATM 1236	O	HOH 239	1.643	5.566	-3.370	1.00	47.13	
ANISOU 1236	O	HOH 239	5057	6716	6136	-2372	-1534	-194
HETATM 1237	O	HOH 240	7.017	7.747	1.875	1.00	38.85	

45/137

Forb. Fig 3c

ANISOU	1237	O	HOH	240	4727	3896	6137	1963	1442	-486	
HETATM	1238	O	HOH	241	15.697	-9.200	24.903	1.00	33.79		
ANISOU	1238	O	HOH	241	3746	5148	3942	-1715	-198	-2554	
HETATM	1239	O	HOH	242	-17.272	9.199	2.810	1.00	44.31		
ANISOU	1239	O	HOH	242	5720	3702	7413	2392	254	-785	
HETATM	1240	O	HOH	243	1.717	-12.017	-6.326	1.00	37.22		
ANISOU	1240	O	HOH	243	5883	3449	4808	-104	-18	-2014	
HETATM	1241	O	HOH	244	5.010	10.584	14.146	1.00	40.04		
ANISOU	1241	O	HOH	244	3637	4884	6694	770	-249	194	
HETATM	1242	O	HOH	245	-1.529	4.972	-3.142	1.00	32.82		
ANISOU	1242	O	HOH	245	3578	2422	6471	705	-587	739	
HETATM	1243	O	HOH	246	12.214	10.841	5.571	1.00	41.22		
ANISOU	1243	O	HOH	246	5743	3682	6236	1971	1267	-1566	
HETATM	1244	O	HOH	247	-1.008	8.261	-9.377	1.00	53.21		
ANISOU	1244	O	HOH	247	6664	6597	6958	-3145	1478	1289	
HETATM	1245	O	HOH	248	4.534	-11.290	9.963	1.00	40.91		
ANISOU	1245	O	HOH	248	6001	5515	4029	-1069	2142	1366	
HETATM	1246	O	HOH	249	-8.044	5.843	10.490	1.00	35.90		
ANISOU	1246	O	HOH	249	4575	3509	5556	10	-1263	-2415	
HETATM	1247	O	HOH	250	1.338	8.803	-2.111	1.00	40.50		
ANISOU	1247	O	HOH	250	4725	6586	4078	-84	1072	954	
HETATM	1248	O	HOH	251	-18.177	8.076	-2.476	1.00	47.71		
ANISOU	1248	O	HOH	251	6100	6970	5058	1139	920	-386	
HETATM	1249	O	HOH	252	3.964	-7.380	29.016	1.00	45.56		
ANISOU	1249	O	HOH	252	8319	5200	3791	-2641	-717	3053	
HETATM	1250	O	HOH	253	18.030	-0.005	18.059	1.00	42.11		
ANISOU	1250	O	HOH	253	4333	5452	6214	1544	-2631	-1202	
HETATM	1251	O	HOH	254	-2.117	0.609	-18.600	1.00	41.95		
ANISOU	1251	O	HOH	254	3889	6019	6032	1695	1664	-1742	
HETATM	1252	O	HOH	255	0.394	-11.345	22.514	1.00	41.13		
ANISOU	1252	O	HOH	255	3973	5266	6387	565	-400	1638	
HETATM	1253	O	HOH	256	13.606	-8.051	25.254	1.00	41.70		
ANISOU	1253	O	HOH	256	4001	5895	5948	0	1781	-2	
HETATM	1254	O	HOH	257	-13.124	9.254	4.958	1.00	39.42		
ANISOU	1254	O	HOH	257	4209	6001	4768	-1278	2033	824	
HETATM	1255	O	HOH	258	-0.429	7.653	-4.225	1.00	38.99		
ANISOU	1255	O	HOH	258	5896	3366	5554	956	393	-1378	
HETATM	1256	O	HOH	259	2.342	0.804	-14.398	1.00	39.68		
ANISOU	1256	O	HOH	259	4458	6358	4260	67	833	848	
HETATM	1257	O	HOH	260	-0.906	-12.056	14.596	1.00	41.62		
ANISOU	1257	O	HOH	260	6178	3825	5812	1216	-1562	913	
HETATM	1258	O	HOH	261	3.046	-10.845	16.995</				

Fig. 3D

```

HEADER      CHAPERONE                                14-MAR-00   1ELW
TITLE       CRYSTAL STRUCTURE OF THE TPR1-DOMAIN OF HOP IN COMPLEX WITH
TITLE       2 A HSC70-PEPTIDE
COMPND      MOL_ID: 1;
COMPND      2 MOLECULE: TPR1-DOMAIN OF HOP;
COMPND      3 CHAIN: A, B;
COMPND      4 FRAGMENT: N-TERMINAL DOMAIN;
COMPND      5 ENGINEERED: YES;
COMPND      6 MOL_ID: 2;
COMPND      7 MOLECULE: HSC70-PEPTIDE;
COMPND      8 CHAIN: C, D;
COMPND      9 ENGINEERED: YES
SOURCE      MOL_ID: 1;
SOURCE      2 ORGANISM_SCIENTIFIC: HOMO SAPIENS;
SOURCE      3 ORGANISM_COMMON: HUMAN;
SOURCE      4 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE      5 EXPRESSION_SYSTEM_COMMON: BACTERIA;
SOURCE      6 EXPRESSION_SYSTEM_PLASMID: PPRO EX HTA;
SOURCE      7 MOL_ID: 2;
SOURCE      8 SYNTHETIC: YES;
SOURCE      9 OTHER_DETAILS: THIS SEQUENCE OCCURS NATURALLY IN HUMANS
KEYWDS      HOP, TPR-DOMAIN, PEPTIDE-COMPLEX, HELICAL REPEAT, HSC70,
KEYWDS      2 HSP70, PROTEIN BINDING
EXPDTA      X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR      C.SCHEUFLER,A.BRINKER,F.U.HARTL,I.MOAREFI
JRNL        AUTH  C.SCHEUFLER,A.BRINKER,F.U.HARTL,I.MOAREFI
JRNL        TITL  CRYSTAL STRUCTURE OF THE TPR1-DOMAIN OF HOP IN
JRNL        TITL 2 COMPLEX WITH A HSC70-PEPTIDE
JRNL        REF   TO BE PUBLISHED
JRNL        REFN

REMARK      1
REMARK      2
REMARK      2 RESOLUTION. 1.6 ANGSTROMS.
REMARK      3
REMARK      3 REFINEMENT.
REMARK      3   PROGRAM       : CNS 1.0
REMARK      3   AUTHORS        : BRUNGER, ADAMS, CLORE, DELANO, GROS, GROSSE-
REMARK      3                   : KUNSTLEVE, JIANG, KUSZEWSKI, NILGES, PANNU,
REMARK      3                   : READ, RICE, SIMONSON, WARREN
REMARK      3
REMARK      3 REFINEMENT TARGET : ENGH & HUBER
REMARK      3
REMARK      3 DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK      3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 1.60
REMARK      3 RESOLUTION RANGE LOW  (ANGSTROMS) : 18.87
REMARK      3 DATA CUTOFF                   (SIGMA(F)) : 0.000
REMARK      3 OUTLIER CUTOFF HIGH (RMS(ABS(F))) : NULL
REMARK      3 COMPLETENESS (WORKING+TEST) (%) : 95.8
REMARK      3 NUMBER OF REFLECTIONS              : 30804
REMARK      3
REMARK      3 FIT TO DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK      3 CROSS-VALIDATION METHOD           : THROUGHOUT
REMARK      3 FREE R VALUE TEST SET SELECTION : RANDOM
REMARK      3 R VALUE                        (WORKING SET) : 0.180
REMARK      3 FREE R VALUE                      : 0.215
REMARK      3 FREE R VALUE TEST SET SIZE (%)    : 10.100
REMARK      3 FREE R VALUE TEST SET COUNT       : 3100
REMARK      3 ESTIMATED ERROR OF FREE R VALUE : 0.004

```

Forb. Fig 3 D

REMARK 3
REMARK 3 FIT IN THE HIGHEST RESOLUTION BIN.
REMARK 3 TOTAL NUMBER OF BINS USED : 6
REMARK 3 BIN RESOLUTION RANGE HIGH (A) : 1.60
REMARK 3 BIN RESOLUTION RANGE LOW (A) : 1.70
REMARK 3 BIN COMPLETENESS (WORKING+TEST) (%) : 81.00
REMARK 3 REFLECTIONS IN BIN (WORKING SET) : 3879
REMARK 3 BIN R VALUE (WORKING SET) : 0.2440
REMARK 3 BIN FREE R VALUE : 0.2640
REMARK 3 BIN FREE R VALUE TEST SET SIZE (%) : 10.00
REMARK 3 BIN FREE R VALUE TEST SET COUNT : 433
REMARK 3 ESTIMATED ERROR OF BIN FREE R VALUE : 0.013
REMARK 3
REMARK 3 NUMBER OF NON-HYDROGEN ATOMS USED IN REFINEMENT.
REMARK 3 PROTEIN ATOMS : 1959
REMARK 3 NUCLEIC ACID ATOMS : 0
REMARK 3 HETEROGEN ATOMS : 36
REMARK 3 SOLVENT ATOMS : 245
REMARK 3
REMARK 3 B VALUES.
REMARK 3 FROM WILSON PLOT (A**2) : 21.80
REMARK 3 MEAN B VALUE (OVERALL, A**2) : 22.20
REMARK 3 OVERALL ANISOTROPIC B VALUE.
REMARK 3 B11 (A**2) : -1.65000
REMARK 3 B22 (A**2) : -1.65000
REMARK 3 B33 (A**2) : 3.30000
REMARK 3 B12 (A**2) : 0.00000
REMARK 3 B13 (A**2) : 0.00000
REMARK 3 B23 (A**2) : 0.00000
REMARK 3
REMARK 3 ESTIMATED COORDINATE ERROR.
REMARK 3 ESD FROM LUZZATI PLOT (A) : 0.16
REMARK 3 ESD FROM SIGMAA (A) : 0.130
REMARK 3 LOW RESOLUTION CUTOFF (A) : 5.00
REMARK 3
REMARK 3 CROSS-VALIDATED ESTIMATED COORDINATE ERROR.
REMARK 3 ESD FROM C-V LUZZATI PLOT (A) : 0.20
REMARK 3 ESD FROM C-V SIGMAA (A) : 0.14
REMARK 3
REMARK 3 RMS DEVIATIONS FROM IDEAL VALUES.
REMARK 3 BOND LENGTHS (A) : 0.008
REMARK 3 BOND ANGLES (DEGREES) : 1.30
REMARK 3 DIHEDRAL ANGLES (DEGREES) : 17.80
REMARK 3 IMPROPER ANGLES (DEGREES) : 0.77
REMARK 3
REMARK 3 ISOTROPIC THERMAL MODEL : RESTRAINED
REMARK 3
REMARK 3 ISOTROPIC THERMAL FACTOR RESTRAINTS. RMS SIGMA
REMARK 3 MAIN-CHAIN BOND (A**2) : 1.13 ; 1.500
REMARK 3 MAIN-CHAIN ANGLE (A**2) : 1.72 ; 2.000
REMARK 3 SIDE-CHAIN BOND (A**2) : 2.27 ; 2.000
REMARK 3 SIDE-CHAIN ANGLE (A**2) : 3.43 ; 2.500
REMARK 3
REMARK 3
REMARK 3 BULK SOLVENT MODELING.
REMARK 3 METHOD USED : FLAT MODEL
REMARK 3 KSOL : 0.42
REMARK 3 BSOL : 46.36
REMARK 3

Forb. Fig. 3 D

```

REMARK 3 NCS MODEL : NULL
REMARK 3
REMARK 3 NCS RESTRAINTS.
REMARK 3 GROUP 1 POSITIONAL RMS SIGMA/WEIGHT
REMARK 3 GROUP 1 B-FACTOR (A) : NULL ; NULL
REMARK 3 (A**2) : NULL ; NULL
REMARK 3
REMARK 3 PARAMETER FILE 1 : PROTEIN_REP.PA
REMARK 3 PARAMETER FILE 2 : WATER_REP.PARA
REMARK 3 PARAMETER FILE 3 : ION.PAR
REMARK 3 PARAMETER FILE 4 : TRS.PAR
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 1 : PROTEIN.TOP
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 2 : TRS.TOP
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 3 : ION.TOP
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 4 : WATER.TOP
REMARK 3
REMARK 3 OTHER REFINEMENT REMARKS: NULL
REMARK 4
REMARK 4 1ELW COMPLIES WITH FORMAT V. 2.3, 09-JULY-1998
REMARK 100
REMARK 100 THIS ENTRY HAS BEEN PROCESSED BY RCSB ON 21-MAR-2000.
REMARK 100 THE RCSB ID CODE IS RCSB010712.
REMARK 200
REMARK 200 EXPERIMENTAL DETAILS
REMARK 200 EXPERIMENT TYPE : X-RAY DIFFRACTION
REMARK 200 DATE OF DATA COLLECTION : 10-02-1999
REMARK 200 TEMPERATURE (KELVIN) : 100.0
REMARK 200 PH : 8.50
REMARK 200 NUMBER OF CRYSTALS USED : 1
REMARK 200
REMARK 200 SYNCHROTRON (Y/N) : Y
REMARK 200 RADIATION SOURCE : NSLS
REMARK 200 BEAMLINE : X12B
REMARK 200 X-RAY GENERATOR MODEL : NULL
REMARK 200 MONOCHROMATIC OR LAUE (M/L) : M
REMARK 200 WAVELENGTH OR RANGE (A) : 0.9490
REMARK 200 MONOCHROMATOR : NULL
REMARK 200 OPTICS : NULL
REMARK 200
REMARK 200 DETECTOR TYPE : CCD
REMARK 200 DETECTOR MANUFACTURER : ADSC-QUANTUM4
REMARK 200 INTENSITY-INTEGRATION SOFTWARE : ADSC
REMARK 200 DATA SCALING SOFTWARE : SCALEPACK
REMARK 200
REMARK 200 NUMBER OF UNIQUE REFLECTIONS : NULL
REMARK 200 RESOLUTION RANGE HIGH (A) : 1.600
REMARK 200 RESOLUTION RANGE LOW (A) : 20.000
REMARK 200 REJECTION CRITERIA (SIGMA(I)) : 0.000
REMARK 200
REMARK 200 OVERALL.
REMARK 200 COMPLETENESS FOR RANGE (%) : 95.8
REMARK 200 DATA REDUNDANCY : 0.000
REMARK 200 R MERGE (I) : 0.04100
REMARK 200 R SYM (I) : NULL
REMARK 200 <I/SIGMA(I)> FOR THE DATA SET : 32.5000
REMARK 200
REMARK 200 IN THE HIGHEST RESOLUTION SHELL.
REMARK 200 HIGHEST RESOLUTION SHELL, RANGE HIGH (A) : 1.60
REMARK 200 HIGHEST RESOLUTION SHELL, RANGE LOW (A) : 1.66
REMARK 200 COMPLETENESS FOR SHELL (%) : 75.2

```

Forb. Fig 3 D

REMARK 200 DATA REDUNDANCY IN SHELL : 0.00
 REMARK 200 R MERGE FOR SHELL (I) : 0.30500
 REMARK 200 R SYM FOR SHELL (I) : NULL
 REMARK 200 <I/SIGMA(I)> FOR SHELL : NULL
 REMARK 200
 REMARK 200 DIFFRACTION PROTOCOL: SINGLE WAVELENGTH
 REMARK 200 METHOD USED TO DETERMINE THE STRUCTURE: NULL
 REMARK 200 SOFTWARE USED: AMORE
 REMARK 200 STARTING MODEL: NULL
 REMARK 200
 REMARK 200 REMARK: NULL
 REMARK 280
 REMARK 280 CRYSTAL
 REMARK 280 SOLVENT CONTENT, VS (%): NULL
 REMARK 280 MATTHEWS COEFFICIENT, VM (ANGSTROMS**3/DA): NULL
 REMARK 280
 REMARK 280 CRYSTALLIZATION CONDITIONS: PEG MME 2000, TRIS, NICKEL
 REMARK 280 CHLORIDE, XYLITOL
 REMARK 290
 REMARK 290 CRYSTALLOGRAPHIC SYMMETRY
 REMARK 290 SYMMETRY OPERATORS FOR SPACE GROUP: P 41
 REMARK 290

	SYMP	SYMMETRY
REMARK 290	NNNMMM	OPERATOR
REMARK 290	1555	X, Y, Z
REMARK 290	2555	-X, -Y, 1/2+Z
REMARK 290	3555	-Y, X, 1/4+Z
REMARK 290	4555	Y, -X, 3/4+Z

REMARK 290	WHERE NNN ->	OPERATOR NUMBER
REMARK 290	MMM ->	TRANSLATION VECTOR

 REMARK 290
 REMARK 290 CRYSTALLOGRAPHIC SYMMETRY TRANSFORMATIONS
 REMARK 290 THE FOLLOWING TRANSFORMATIONS OPERATE ON THE ATOM/HETATM
 REMARK 290 RECORDS IN THIS ENTRY TO PRODUCE CRYSTALLOGRAPHICALLY
 REMARK 290 RELATED MOLECULES.

REMARK 290	SMTRY1	1	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY2	1	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY3	1	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY1	2	-1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY2	2	0.000000	-1.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY3	2	0.000000	0.000000	1.000000	21.44500
REMARK 290	SMTRY1	3	0.000000	-1.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY2	3	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY3	3	0.000000	0.000000	1.000000	10.72250
REMARK 290	SMTRY1	4	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY2	4	-1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
REMARK 290	SMTRY3	4	0.000000	0.000000	1.000000	32.16750

 REMARK 290
 REMARK 290 REMARK: NULL
 REMARK 300
 REMARK 300 BIOMOLECULE: 1, 2
 REMARK 300 THIS ENTRY CONTAINS THE CRYSTALLOGRAPHIC ASYMMETRIC UNIT
 REMARK 300 WHICH CONSISTS OF 4 CHAIN(S). SEE REMARK 350 FOR
 REMARK 300 INFORMATION ON GENERATING THE BIOLOGICAL MOLECULE(S).
 REMARK 350
 REMARK 350 GENERATING THE BIOMOLECULE
 REMARK 350 COORDINATES FOR A COMPLETE MULTIMER REPRESENTING THE KNOWN
 REMARK 350 BIOLOGICALLY SIGNIFICANT OLIGOMERIZATION STATE OF THE

Forb. Fig 3D

REMARK 350 MOLECULE CAN BE GENERATED BY APPLYING BIOMT TRANSFORMATIONS
REMARK 350 GIVEN BELOW. BOTH NON-CRYSTALLOGRAPHIC AND
REMARK 350 CRYSTALLOGRAPHIC OPERATIONS ARE GIVEN.

REMARK 350

REMARK 350 BIOMOLECULE: 1

REMARK 350 APPLY THE FOLLOWING TO CHAINS: A, C

REMARK 350	BIOMT1	1	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
------------	--------	---	----------	----------	----------	----------

REMARK 350	BIOMT2	1	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
------------	--------	---	----------	----------	----------	----------

REMARK 350	BIOMT3	1	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000
------------	--------	---	----------	----------	----------	----------

REMARK 350 BIOMOLECULE: 2

REMARK 350 APPLY THE FOLLOWING TO CHAINS: B, D

REMARK 350	BIOMT1	2	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
------------	--------	---	----------	----------	----------	----------

REMARK 350	BIOMT2	2	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
------------	--------	---	----------	----------	----------	----------

REMARK 350	BIOMT3	2	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000
------------	--------	---	----------	----------	----------	----------

REMARK 465

REMARK 465 MISSING RESIDUES

REMARK 465 THE FOLLOWING RESIDUES WERE NOT LOCATED IN THE

REMARK 465 EXPERIMENT. (M=MODEL NUMBER; RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN

REMARK 465 IDENTIFIER; SSSEQ=SEQUENCE NUMBER; I=INSERTION CODE.)

REMARK 465

REMARK 465	M	RES	C	SSSEQI
------------	---	-----	---	--------

REMARK 465	MET	A		1
------------	-----	---	--	---

REMARK 465	GLU	B		116
------------	-----	---	--	-----

REMARK 465	ALA	B		117
------------	-----	---	--	-----

REMARK 465	ARG	B		118
------------	-----	---	--	-----

REMARK 470

REMARK 470 MISSING ATOM

REMARK 470 THE FOLLOWING RESIDUES HAVE MISSING ATOMS (M=MODEL NUMBER;

REMARK 470 RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN IDENTIFIER; SSEQ=SEQUENCE NUMBER;

REMARK 470 I=INSERTION CODE):

REMARK 470	M	RES	CSSEQI	ATOMS
------------	---	-----	--------	-------

REMARK 470	GLU	A	2	CG	CD	OE1	OE2
------------	-----	---	---	----	----	-----	-----

REMARK 470	MET	B	1	CG	SD	CE	
------------	-----	---	---	----	----	----	--

REMARK 470	GLU	B	2	CG	CD	OE1	OE2
------------	-----	---	---	----	----	-----	-----

REMARK 470	GLU	B	110	CG	CD	OE1	OE2
------------	-----	---	-----	----	----	-----	-----

REMARK 500

REMARK 500 GEOMETRY AND STEREOCHEMISTRY

REMARK 500 SUBTOPIC: COVALENT BOND LENGTHS

REMARK 500

REMARK 500 THE STEREOCHEMICAL PARAMETERS OF THE FOLLOWING RESIDUES

REMARK 500 HAVE VALUES WHICH DEVIATE FROM EXPECTED VALUES BY MORE

REMARK 500 THAN 6*RMSD (M=MODEL NUMBER; RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN

REMARK 500 IDENTIFIER; SSEQ=SEQUENCE NUMBER; I=INSERTION CODE).

REMARK 500

REMARK 500 STANDARD TABLE:

REMARK 500 FORMAT: (10X, I3, 1X, 2 (A3, 1X, A1, I4, A1, 1X, A4, 3X), F6.3)

REMARK 500

REMARK 500 EXPECTED VALUES: ENGH AND HUBER, 1991

REMARK 500

REMARK 500	M	RES	CSSEQI	ATM1	RES	CSSEQI	ATM2	DEVIATION
------------	---	-----	--------	------	-----	--------	------	-----------

REMARK 500	GLY	D	5	CA	GLY	D	5	N	0.051
------------	-----	---	---	----	-----	---	---	---	-------

REMARK 500

REMARK 500 GEOMETRY AND STEREOCHEMISTRY

REMARK 500 SUBTOPIC: COVALENT BOND ANGLES

REMARK 500

REMARK 500 THE STEREOCHEMICAL PARAMETERS OF THE FOLLOWING RESIDUES

REMARK 500 HAVE VALUES WHICH DEVIATE FROM EXPECTED VALUES BY MORE

REMARK 500 THAN 6*RMSD (M=MODEL NUMBER; RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN

REMARK 500 IDENTIFIER; SSEQ=SEQUENCE NUMBER; I=INSERTION CODE).

Forb. Fig 3D

REMARK 500
 REMARK 500 STANDARD TABLE:
 REMARK 500 FORMAT: (10X,I3,1X,A3,1X,A1,I4,A1,3(1X,A4,2X),12X,F5.1)
 REMARK 500
 REMARK 500 EXPECTED VALUES: ENGH AND HUBER, 1991
 REMARK 500
 REMARK 500 M RES CSSEQI ATM1 ATM2 ATM3
 REMARK 500 ASP A 53 N - CA - C ANGL. DEV. = -8.3 DEGREES
 REMARK 500 ALA A 103 N - CA - C ANGL. DEV. = 7.6 DEGREES
 REMARK 900
 REMARK 900 RELATED ENTRIES
 REMARK 900 RELATED ID: 1ELR RELATED DB: PDB
 DBREF 1ELW A 1 118 SWS P31948 IEFS_HUMAN 1 118
 DBREF 1ELW B 1 118 SWS P31948 IEFS_HUMAN 1 118
 SEQRES 1 A 118 MET GLU GLN VAL ASN GLU LEU LYS GLU LYS GLY ASN LYS
 SEQRES 2 A 118 ALA LEU SER VAL GLY ASN ILE ASP ASP ALA LEU GLN CYS
 SEQRES 3 A 118 TYR SER GLU ALA ILE LYS LEU ASP PRO HIS ASN HIS VAL
 SEQRES 4 A 118 LEU TYR SER ASN ARG SER ALA ALA TYR ALA LYS LYS GLY
 SEQRES 5 A 118 ASP TYR GLN LYS ALA TYR GLU ASP GLY CYS LYS THR VAL
 SEQRES 6 A 118 ASP LEU LYS PRO ASP TRP GLY LYS GLY TYR SER ARG LYS
 SEQRES 7 A 118 ALA ALA ALA LEU GLU PHE LEU ASN ARG PHE GLU GLU ALA
 SEQRES 8 A 118 LYS ARG THR TYR GLU GLU GLY LEU LYS HIS GLU ALA ASN
 SEQRES 9 A 118 ASN PRO GLN LEU LYS GLU GLY LEU GLN ASN MET GLU ALA
 SEQRES 10 A 118 ARG
 SEQRES 1 B 118 MET GLU GLN VAL ASN GLU LEU LYS GLU LYS GLY ASN LYS
 SEQRES 2 B 118 ALA LEU SER VAL GLY ASN ILE ASP ASP ALA LEU GLN CYS
 SEQRES 3 B 118 TYR SER GLU ALA ILE LYS LEU ASP PRO HIS ASN HIS VAL
 SEQRES 4 B 118 LEU TYR SER ASN ARG SER ALA ALA TYR ALA LYS LYS GLY
 SEQRES 5 B 118 ASP TYR GLN LYS ALA TYR GLU ASP GLY CYS LYS THR VAL
 SEQRES 6 B 118 ASP LEU LYS PRO ASP TRP GLY LYS GLY TYR SER ARG LYS
 SEQRES 7 B 118 ALA ALA ALA LEU GLU PHE LEU ASN ARG PHE GLU GLU ALA
 SEQRES 8 B 118 LYS ARG THR TYR GLU GLU GLY LEU LYS HIS GLU ALA ASN
 SEQRES 9 B 118 ASN PRO GLN LEU LYS GLU GLY LEU GLN ASN MET GLU ALA
 SEQRES 10 B 118 ARG
 SEQRES 1 C 8 GLY PRO THR ILE GLU GLU VAL ASP
 SEQRES 1 D 8 GLY PRO THR ILE GLU GLU VAL ASP
 HET NI B 401 1
 HET NI A 402 1
 HET NI A 403 1
 HET NI B 404 1
 HET TRS 301 8
 HET TRS 302 8
 HET TRS 303 8
 HET TRS 304 8
 HETNAM NI NICKEL (II) ION
 HETNAM TRS 2-AMINO-2-HYDROXYMETHYL-PROPANE-1,3-DIOL
 HETSYN TRS TRIS BUFFER
 FORMUL 5 NI 4(NI1 2+)
 FORMUL 9 TRS 4(C4 H12 N1 O3 1+)
 FORMUL 13 HOH *245(H2 O1)
 HELIX 1 1 GLU A 2 VAL A 17 1
 HELIX 2 2 ASN A 19 ASP A 34 1
 HELIX 3 3 ASN A 37 GLY A 52 1
 HELIX 4 4 ASP A 53 LYS A 68 1
 HELIX 5 5 TRP A 71 LEU A 85 1
 HELIX 6 6 ARG A 87 LYS A 100 1
 HELIX 7 7 ASN A 105 ARG A 118 1
 HELIX 8 8 MET B 1 VAL B 17 1
 HELIX 9 9 ASN B 19 ASP B 34 1

16
 16
 16
 16
 15
 14
 14
 17
 16

[illegible]

Forb. Fig 3 D

ATOM	48	CA	LYS	A	8	41.093	49.450	29.408	1.00	16.95	C
ATOM	49	C	LYS	A	8	39.966	48.445	29.137	1.00	17.00	C
ATOM	50	O	LYS	A	8	38.955	48.793	28.521	1.00	17.39	O
ATOM	51	CB	LYS	A	8	42.242	49.197	28.412	1.00	17.32	C
ATOM	52	CG	LYS	A	8	41.797	49.375	26.964	1.00	19.67	C
ATOM	53	CD	LYS	A	8	42.776	48.743	25.966	1.00	21.10	C
ATOM	54	CE	LYS	A	8	42.755	47.234	26.098	1.00	22.93	C
ATOM	55	NZ	LYS	A	8	43.366	46.518	24.963	1.00	23.81	N
ATOM	56	N	GLU	A	9	40.158	47.197	29.576	1.00	18.23	N
ATOM	57	CA	GLU	A	9	39.155	46.152	29.371	1.00	19.85	C
ATOM	58	C	GLU	A	9	37.876	46.488	30.109	1.00	18.59	C
ATOM	59	O	GLU	A	9	36.782	46.235	29.618	1.00	19.13	O
ATOM	60	CB	GLU	A	9	39.667	44.799	29.872	1.00	23.22	C
ATOM	61	CG	GLU	A	9	40.713	44.187	28.994	1.00	29.38	C
ATOM	62	CD	GLU	A	9	40.222	44.037	27.577	1.00	32.75	C
ATOM	63	OE1	GLU	A	9	39.115	43.474	27.379	1.00	35.49	O
ATOM	64	OE2	GLU	A	9	40.941	44.484	26.659	1.00	36.76	O
ATOM	65	N	LYS	A	10	38.022	47.046	31.301	1.00	18.75	N
ATOM	66	CA	LYS	A	10	36.859	47.417	32.100	1.00	19.39	C
ATOM	67	C	LYS	A	10	36.101	48.487	31.319	1.00	17.74	C
ATOM	68	O	LYS	A	10	34.868	48.488	31.267	1.00	16.53	O
ATOM	69	CB	LYS	A	10	37.318	47.981	33.440	1.00	23.14	C
ATOM	70	CG	LYS	A	10	36.280	47.894	34.538	1.00	28.22	C
ATOM	71	CD	LYS	A	10	36.912	48.226	35.883	1.00	30.40	C
ATOM	72	CE	LYS	A	10	36.596	49.646	36.307	1.00	32.96	C
ATOM	73	NZ	LYS	A	10	37.309	49.999	37.571	1.00	37.05	N
ATOM	74	N	GLY	A	11	36.856	49.396	30.716	1.00	15.74	N
ATOM	75	CA	GLY	A	11	36.237	50.445	29.923	1.00	14.66	C
ATOM	76	C	GLY	A	11	35.529	49.876	28.705	1.00	14.20	C
ATOM	77	O	GLY	A	11	34.405	50.277	28.391	1.00	14.74	O
ATOM	78	N	ASN	A	12	36.183	48.941	28.014	1.00	14.73	N
ATOM	79	CA	ASN	A	12	35.582	48.324	26.835	1.00	15.47	C
ATOM	80	C	ASN	A	12	34.268	47.626	27.231	1.00	16.29	C
ATOM	81	O	ASN	A	12	33.281	47.681	26.490	1.00	14.67	O
ATOM	82	CB	ASN	A	12	36.547	47.289	26.208	1.00	14.82	C
ATOM	83	CG	ASN	A	12	37.780	47.915	25.559	1.00	15.94	C
ATOM	84	OD1	ASN	A	12	38.653	47.181	25.062	1.00	19.78	O
ATOM	85	ND2	ASN	A	12	37.863	49.244	25.544	1.00	12.58	N
ATOM	86	N	LYS	A	13	34.268	46.959	28.384	1.00	16.95	N
ATOM	87	CA	LYS	A	13	33.056	46.277	28.847	1.00	17.04	C
ATOM	88	C	LYS	A	13	31.943	47.267	29.173	1.00	17.98	C
ATOM	89	O	LYS	A	13	30.780	47.039	28.813	1.00	17.28	O
ATOM	90	CB	LYS	A	13	33.365	45.409	30.061	1.00	20.33	C
ATOM	91	CG	LYS	A	13	34.350	44.321	29.701	1.00	25.23	C
ATOM	92	CD	LYS	A	13	34.504	43.251	30.747	1.00	30.13	C
ATOM	93	CE	LYS	A	13	35.659	42.330	30.341	1.00	32.91	C
ATOM	94	NZ	LYS	A	13	35.643	41.044	31.072	1.00	34.80	N
ATOM	95	N	ALA	A	14	32.284	48.368	29.838	1.00	14.92	N
ATOM	96	CA	ALA	A	14	31.280	49.371	30.170	1.00	14.85	C
ATOM	97	C	ALA	A	14	30.679	49.907	28.881	1.00	15.53	C
ATOM	98	O	ALA	A	14	29.463	50.067	28.748	1.00	16.49	O
ATOM	99	CB	ALA	A	14	31.909	50.508	30.956	1.00	16.37	C
ATOM	100	N	LEU	A	15	31.545	50.167	27.911	1.00	16.36	N
ATOM	101	CA	LEU	A	15	31.069	50.689	26.643	1.00	17.54	C
ATOM	102	C	LEU	A	15	30.148	49.660	25.983	1.00	18.82	C
ATOM	103	O	LEU	A	15	29.120	50.028	25.388	1.00	19.85	O
ATOM	104	CB	LEU	A	15	32.282	51.015	25.758	1.00	19.18	C
ATOM	105	CG	LEU	A	15	32.039	51.949	24.574	1.00	20.52	C
ATOM	106	CD1	LEU	A	15	31.460	53.255	25.030	1.00	20.48	C

Forb. Fig 3D

ATOM	107	CD2	LEU	A	15	33.365	52.178	23.847	1.00	18.61	C
ATOM	108	N	SER	A	16	30.489	48.379	26.107	1.00	18.56	N
ATOM	109	CA	SER	A	16	29.683	47.318	25.490	1.00	20.86	C
ATOM	110	C	SER	A	16	28.287	47.216	26.085	1.00	21.02	C
ATOM	111	O	SER	A	16	27.360	46.797	25.395	1.00	22.19	O
ATOM	112	CB	SER	A	16	30.365	45.954	25.589	1.00	23.01	C
ATOM	113	OG	SER	A	16	30.200	45.369	26.861	1.00	25.44	O
ATOM	114	N	VAL	A	17	28.124	47.587	27.352	1.00	18.83	N
ATOM	115	CA	VAL	A	17	26.781	47.533	27.949	1.00	18.24	C
ATOM	116	C	VAL	A	17	26.101	48.900	27.896	1.00	17.22	C
ATOM	117	O	VAL	A	17	25.070	49.136	28.545	1.00	19.37	O
ATOM	118	CB	VAL	A	17	26.795	47.013	29.433	1.00	18.59	C
ATOM	119	CG1	VAL	A	17	27.359	45.588	29.492	1.00	19.96	C
ATOM	120	CG2	VAL	A	17	27.567	47.956	30.351	1.00	16.88	C
ATOM	121	N	GLY	A	18	26.671	49.819	27.122	1.00	17.46	N
ATOM	122	CA	GLY	A	18	26.068	51.138	26.975	1.00	16.60	C
ATOM	123	C	GLY	A	18	26.320	52.141	28.079	1.00	17.85	C
ATOM	124	O	GLY	A	18	25.698	53.206	28.109	1.00	19.21	O
ATOM	125	N	ASN	A	19	27.235	51.821	28.994	1.00	16.49	N
ATOM	126	CA	ASN	A	19	27.539	52.739	30.088	1.00	15.89	C
ATOM	127	C	ASN	A	19	28.735	53.564	29.640	1.00	16.44	C
ATOM	128	O	ASN	A	19	29.857	53.330	30.074	1.00	15.66	O
ATOM	129	CB	ASN	A	19	27.847	51.941	31.360	1.00	16.80	C
ATOM	130	CG	ASN	A	19	26.602	51.265	31.926	1.00	17.82	C
ATOM	131	OD1	ASN	A	19	26.684	50.304	32.698	1.00	21.57	O
ATOM	132	ND2	ASN	A	19	25.444	51.771	31.537	1.00	15.68	N
ATOM	133	N	ILE	A	20	28.470	54.541	28.772	1.00	17.58	N
ATOM	134	CA	ILE	A	20	29.552	55.364	28.220	1.00	17.20	C
ATOM	135	C	ILE	A	20	30.282	56.199	29.272	1.00	17.91	C
ATOM	136	O	ILE	A	20	31.513	56.305	29.228	1.00	16.78	O
ATOM	137	CB	ILE	A	20	29.061	56.287	27.086	1.00	19.01	C
ATOM	138	CG1	ILE	A	20	28.403	55.469	25.961	1.00	19.60	C
ATOM	139	CG2	ILE	A	20	30.278	57.008	26.461	1.00	19.64	C
ATOM	140	CD1	ILE	A	20	27.712	56.331	24.886	1.00	22.20	C
ATOM	141	N	ASP	A	21	29.559	56.795	30.220	1.00	17.70	N
ATOM	142	CA	ASP	A	21	30.246	57.582	31.245	1.00	19.40	C
ATOM	143	C	ASP	A	21	31.193	56.720	32.084	1.00	18.46	C
ATOM	144	O	ASP	A	21	32.268	57.179	32.501	1.00	18.91	O
ATOM	145	CB	ASP	A	21	29.235	58.316	32.141	1.00	21.40	C
ATOM	146	CG	ASP	A	21	28.686	59.574	31.481	1.00	26.43	C
ATOM	147	OD1	ASP	A	21	27.768	60.185	32.063	1.00	27.85	O
ATOM	148	OD2	ASP	A	21	29.174	59.957	30.388	1.00	26.89	O
ATOM	149	N	ASP	A	22	30.817	55.469	32.327	1.00	18.17	N
ATOM	150	CA	ASP	A	22	31.679	54.566	33.078	1.00	17.79	C
ATOM	151	C	ASP	A	22	32.903	54.242	32.221	1.00	16.30	C
ATOM	152	O	ASP	A	22	34.014	54.170	32.723	1.00	17.55	O
ATOM	153	CB	ASP	A	22	30.944	53.271	33.439	1.00	21.66	C
ATOM	154	CG	ASP	A	22	30.011	53.438	34.631	1.00	27.11	C
ATOM	155	OD1	ASP	A	22	30.067	54.490	35.311	1.00	29.50	O
ATOM	156	OD2	ASP	A	22	29.222	52.508	34.897	1.00	29.52	O
ATOM	157	N	ALA	A	23	32.688	54.065	30.924	1.00	15.01	N
ATOM	158	CA	ALA	A	23	33.786	53.758	30.024	1.00	14.90	C
ATOM	159	C	ALA	A	23	34.782	54.924	30.042	1.00	15.37	C
ATOM	160	O	ALA	A	23	36.003	54.718	30.150	1.00	16.11	O
ATOM	161	CB	ALA	A	23	33.247	53.523	28.597	1.00	15.47	C
ATOM	162	N	LEU	A	24	34.268	56.146	29.946	1.00	16.22	N
ATOM	163	CA	LEU	A	24	35.147	57.325	29.940	1.00	16.69	C
ATOM	164	C	LEU	A	24	35.968	57.413	31.222	1.00	16.84	C
ATOM	165	O	LEU	A	24	37.138	57.778	31.218	1.00	16.89	O

Forb. Fig. 3D

ATOM	166	CB	LEU	A	24	34.315	58.598	29.767	1.00	16.48	C
ATOM	167	CG	LEU	A	24	33.611	58.770	28.418	1.00	15.39	C
ATOM	168	CD1	LEU	A	24	32.614	59.933	28.438	1.00	18.19	C
ATOM	169	CD2	LEU	A	24	34.681	58.993	27.360	1.00	15.83	C
ATOM	170	N	GLN	A	25	35.338	57.076	32.335	1.00	17.30	N
ATOM	171	CA	GLN	A	25	36.015	57.133	33.612	1.00	18.91	C
ATOM	172	C	GLN	A	25	37.140	56.093	33.623	1.00	17.60	C
ATOM	173	O	GLN	A	25	38.255	56.380	34.053	1.00	19.11	O
ATOM	174	CB	GLN	A	25	34.982	56.875	34.712	1.00	21.86	C
ATOM	175	CG	GLN	A	25	35.412	57.249	36.114	1.00	28.36	C
ATOM	176	CD	GLN	A	25	34.317	56.971	37.129	1.00	32.37	C
ATOM	177	OE1	GLN	A	25	33.472	57.829	37.416	1.00	34.85	O
ATOM	178	NE2	GLN	A	25	34.314	55.756	37.663	1.00	33.18	N
ATOM	179	N	CYS	A	26	36.853	54.890	33.129	1.00	15.50	N
ATOM	180	CA	CYS	A	26	37.867	53.836	33.090	1.00	15.46	C
ATOM	181	C	CYS	A	26	39.028	54.240	32.189	1.00	16.11	C
ATOM	182	O	CYS	A	26	40.184	54.078	32.559	1.00	16.52	O
ATOM	183	CB	CYS	A	26	37.300	52.521	32.561	1.00	17.41	C
ATOM	184	SG	CYS	A	26	36.112	51.735	33.686	1.00	18.17	S
ATOM	185	N	TYR	A	27	38.723	54.723	30.984	1.00	14.95	N
ATOM	186	CA	TYR	A	27	39.806	55.126	30.083	1.00	14.75	C
ATOM	187	C	TYR	A	27	40.609	56.292	30.652	1.00	15.62	C
ATOM	188	O	TYR	A	27	41.836	56.334	30.535	1.00	14.83	O
ATOM	189	CB	TYR	A	27	39.269	55.530	28.714	1.00	14.79	C
ATOM	190	CG	TYR	A	27	38.519	54.429	28.011	1.00	13.65	C
ATOM	191	CD1	TYR	A	27	38.981	53.115	28.033	1.00	13.30	C
ATOM	192	CD2	TYR	A	27	37.385	54.725	27.253	1.00	13.12	C
ATOM	193	CE1	TYR	A	27	38.336	52.115	27.303	1.00	13.86	C
ATOM	194	CE2	TYR	A	27	36.723	53.734	26.517	1.00	12.61	C
ATOM	195	CZ	TYR	A	27	37.210	52.439	26.545	1.00	12.10	C
ATOM	196	OH	TYR	A	27	36.599	51.487	25.782	1.00	12.51	O
ATOM	197	N	SER	A	28	39.919	57.242	31.268	1.00	16.09	N
ATOM	198	CA	SER	A	28	40.605	58.389	31.842	1.00	17.53	C
ATOM	199	C	SER	A	28	41.522	57.974	32.997	1.00	18.12	C
ATOM	200	O	SER	A	28	42.601	58.531	33.146	1.00	18.86	O
ATOM	201	CB	SER	A	28	39.588	59.429	32.308	1.00	15.11	C
ATOM	202	OG	SER	A	28	38.856	59.976	31.212	1.00	16.20	O
ATOM	203	N	GLU	A	29	41.100	56.998	33.806	1.00	20.28	N
ATOM	204	CA	GLU	A	29	41.929	56.524	34.915	1.00	21.03	C
ATOM	205	C	GLU	A	29	43.161	55.817	34.356	1.00	21.83	C
ATOM	206	O	GLU	A	29	44.270	55.960	34.874	1.00	21.97	O
ATOM	207	CB	GLU	A	29	41.144	55.564	35.817	1.00	23.46	C
ATOM	208	CG	GLU	A	29	41.889	55.219	37.103	1.00	27.24	C
ATOM	209	CD	GLU	A	29	41.135	54.246	37.978	1.00	29.71	C
ATOM	210	OE1	GLU	A	29	39.900	54.145	37.822	1.00	29.11	O
ATOM	211	OE2	GLU	A	29	41.781	53.596	38.832	1.00	31.35	O
ATOM	212	N	ALA	A	30	42.976	55.053	33.284	1.00	19.67	N
ATOM	213	CA	ALA	A	30	44.100	54.359	32.676	1.00	18.43	C
ATOM	214	C	ALA	A	30	45.076	55.370	32.082	1.00	18.16	C
ATOM	215	O	ALA	A	30	46.299	55.188	32.151	1.00	19.62	O
ATOM	216	CB	ALA	A	30	43.602	53.406	31.573	1.00	17.49	C
ATOM	217	N	ILE	A	31	44.536	56.426	31.491	1.00	16.69	N
ATOM	218	CA	ILE	A	31	45.364	57.442	30.862	1.00	17.50	C
ATOM	219	C	ILE	A	31	46.235	58.143	31.893	1.00	19.93	C
ATOM	220	O	ILE	A	31	47.379	58.504	31.611	1.00	22.10	O
ATOM	221	CB	ILE	A	31	44.486	58.442	30.106	1.00	17.04	C
ATOM	222	CG1	ILE	A	31	43.983	57.779	28.812	1.00	14.54	C
ATOM	223	CG2	ILE	A	31	45.249	59.715	29.791	1.00	16.83	C
ATOM	224	CD1	ILE	A	31	42.916	58.591	28.104	1.00	13.81	C

Forb. Fig 3D

ATOM	225	N	LYS	A	32	45.695	58.317	33.093	1.00	20.62	N
ATOM	226	CA	LYS	A	32	46.437	58.958	34.176	1.00	24.13	C
ATOM	227	C	LYS	A	32	47.651	58.091	34.500	1.00	23.61	C
ATOM	228	O	LYS	A	32	48.753	58.595	34.748	1.00	25.17	O
ATOM	229	CB	LYS	A	32	45.527	59.078	35.396	1.00	26.31	C
ATOM	230	CG	LYS	A	32	45.885	60.167	36.380	1.00	30.80	C
ATOM	231	CD	LYS	A	32	44.877	60.167	37.530	1.00	33.84	C
ATOM	232	CE	LYS	A	32	43.484	60.589	37.053	1.00	36.68	C
ATOM	233	NZ	LYS	A	32	42.423	60.417	38.096	1.00	38.57	N
ATOM	234	N	LEU	A	33	47.450	56.777	34.493	1.00	22.83	N
ATOM	235	CA	LEU	A	33	48.533	55.836	34.779	1.00	23.82	C
ATOM	236	C	LEU	A	33	49.525	55.682	33.633	1.00	24.28	C
ATOM	237	O	LEU	A	33	50.713	55.471	33.858	1.00	24.76	O
ATOM	238	CB	LEU	A	33	47.964	54.451	35.065	1.00	25.96	C
ATOM	239	CG	LEU	A	33	47.057	54.217	36.261	1.00	27.40	C
ATOM	240	CD1	LEU	A	33	46.482	52.820	36.166	1.00	27.86	C
ATOM	241	CD2	LEU	A	33	47.855	54.373	37.544	1.00	28.69	C
ATOM	242	N	ASP	A	34	49.030	55.800	32.404	1.00	22.58	N
ATOM	243	CA	ASP	A	34	49.850	55.576	31.218	1.00	21.94	C
ATOM	244	C	ASP	A	34	49.474	56.644	30.202	1.00	21.42	C
ATOM	245	O	ASP	A	34	48.801	56.353	29.208	1.00	20.49	O
ATOM	246	CB	ASP	A	34	49.502	54.177	30.701	1.00	24.02	C
ATOM	247	CG	ASP	A	34	50.479	53.643	29.686	1.00	26.55	C
ATOM	248	OD1	ASP	A	34	51.509	54.288	29.422	1.00	29.51	O
ATOM	249	OD2	ASP	A	34	50.195	52.548	29.159	1.00	28.61	O
ATOM	250	N	PRO	A	35	49.925	57.888	30.421	1.00	21.16	N
ATOM	251	CA	PRO	A	35	49.610	59.005	29.525	1.00	20.87	C
ATOM	252	C	PRO	A	35	50.123	58.962	28.099	1.00	19.04	C
ATOM	253	O	PRO	A	35	49.758	59.812	27.305	1.00	19.08	O
ATOM	254	CB	PRO	A	35	50.135	60.217	30.288	1.00	22.99	C
ATOM	255	CG	PRO	A	35	51.303	59.655	31.014	1.00	22.94	C
ATOM	256	CD	PRO	A	35	50.769	58.349	31.542	1.00	22.68	C
ATOM	257	N	HIS	A	36	50.956	57.977	27.780	1.00	19.68	N
ATOM	258	CA	HIS	A	36	51.499	57.866	26.433	1.00	20.52	C
ATOM	259	C	HIS	A	36	50.886	56.707	25.689	1.00	19.83	C
ATOM	260	O	HIS	A	36	51.348	56.361	24.602	1.00	20.25	O
ATOM	261	CB	HIS	A	36	53.006	57.645	26.485	1.00	25.16	C
ATOM	262	CG	HIS	A	36	53.790	58.885	26.750	1.00	29.95	C
ATOM	263	ND1	HIS	A	36	54.223	59.719	25.740	1.00	33.07	N
ATOM	264	CD2	HIS	A	36	54.228	59.434	27.907	1.00	32.14	C
ATOM	265	CE1	HIS	A	36	54.895	60.727	26.265	1.00	32.15	C
ATOM	266	NE2	HIS	A	36	54.912	60.578	27.577	1.00	32.72	N
ATOM	267	N	ASN	A	37	49.838	56.110	26.252	1.00	19.13	N
ATOM	268	CA	ASN	A	37	49.207	54.964	25.602	1.00	16.94	C
ATOM	269	C	ASN	A	37	48.166	55.414	24.568	1.00	15.90	C
ATOM	270	O	ASN	A	37	47.041	55.759	24.913	1.00	17.03	O
ATOM	271	CB	ASN	A	37	48.563	54.067	26.672	1.00	17.91	C
ATOM	272	CG	ASN	A	37	48.062	52.744	26.117	1.00	19.43	C
ATOM	273	OD1	ASN	A	37	47.623	52.663	24.970	1.00	19.37	O
ATOM	274	ND2	ASN	A	37	48.094	51.698	26.946	1.00	19.88	N
ATOM	275	N	HIS	A	38	48.543	55.378	23.294	1.00	14.62	N
ATOM	276	CA	HIS	A	38	47.653	55.803	22.226	1.00	13.90	C
ATOM	277	C	HIS	A	38	46.345	55.030	22.160	1.00	14.07	C
ATOM	278	O	HIS	A	38	45.308	55.568	21.720	1.00	14.09	O
ATOM	279	CB	HIS	A	38	48.383	55.706	20.885	1.00	13.69	C
ATOM	280	CG	HIS	A	38	48.819	54.320	20.532	1.00	15.10	C
ATOM	281	ND1	HIS	A	38	49.848	53.677	21.184	1.00	17.70	N
ATOM	282	CD2	HIS	A	38	48.359	53.450	19.601	1.00	18.35	C
ATOM	283	CE1	HIS	A	38	50.004	52.469	20.671	1.00	18.04	C

For. Fig 3D

ATOM	284	NE2	HIS	A	38	49.113	52.308	19.713	1.00	17.50	N
ATOM	285	N	VAL	A	39	46.376	53.760	22.559	1.00	13.23	N
ATOM	286	CA	VAL	A	39	45.160	52.959	22.488	1.00	13.44	C
ATOM	287	C	VAL	A	39	44.093	53.519	23.413	1.00	13.78	C
ATOM	288	O	VAL	A	39	42.912	53.519	23.079	1.00	12.78	O
ATOM	289	CB	VAL	A	39	45.437	51.495	22.851	1.00	14.76	C
ATOM	290	CG1	VAL	A	39	44.125	50.712	22.893	1.00	16.70	C
ATOM	291	CG2	VAL	A	39	46.392	50.899	21.812	1.00	18.62	C
ATOM	292	N	LEU	A	40	44.513	54.013	24.575	1.00	12.58	N
ATOM	293	CA	LEU	A	40	43.549	54.566	25.525	1.00	12.03	C
ATOM	294	C	LEU	A	40	42.881	55.813	24.960	1.00	11.05	C
ATOM	295	O	LEU	A	40	41.663	55.980	25.090	1.00	12.16	O
ATOM	296	CB	LEU	A	40	44.237	54.907	26.852	1.00	11.87	C
ATOM	297	CG	LEU	A	40	44.961	53.747	27.526	1.00	13.90	C
ATOM	298	CD1	LEU	A	40	45.629	54.259	28.797	1.00	15.98	C
ATOM	299	CD2	LEU	A	40	43.989	52.628	27.859	1.00	14.67	C
ATOM	300	N	TYR	A	41	43.657	56.693	24.329	1.00	12.25	N
ATOM	301	CA	TYR	A	41	43.060	57.905	23.758	1.00	12.74	C
ATOM	302	C	TYR	A	41	42.163	57.564	22.579	1.00	11.60	C
ATOM	303	O	TYR	A	41	41.136	58.202	22.372	1.00	11.99	O
ATOM	304	CB	TYR	A	41	44.132	58.899	23.312	1.00	12.56	C
ATOM	305	CG	TYR	A	41	44.888	59.498	24.461	1.00	14.05	C
ATOM	306	CD1	TYR	A	41	44.419	60.624	25.133	1.00	16.01	C
ATOM	307	CD2	TYR	A	41	46.097	58.930	24.867	1.00	16.42	C
ATOM	308	CE1	TYR	A	41	45.169	61.175	26.188	1.00	18.21	C
ATOM	309	CE2	TYR	A	41	46.839	59.463	25.898	1.00	18.78	C
ATOM	310	CZ	TYR	A	41	46.384	60.575	26.545	1.00	18.96	C
ATOM	311	OH	TYR	A	41	47.204	61.103	27.528	1.00	23.38	O
ATOM	312	N	SER	A	42	42.547	56.551	21.809	1.00	10.96	N
ATOM	313	CA	SER	A	42	41.736	56.162	20.674	1.00	11.16	C
ATOM	314	C	SER	A	42	40.403	55.613	21.185	1.00	11.27	C
ATOM	315	O	SER	A	42	39.349	55.955	20.651	1.00	11.37	O
ATOM	316	CB	SER	A	42	42.447	55.097	19.837	1.00	12.25	C
ATOM	317	OG	SER	A	42	41.565	54.630	18.835	1.00	11.58	O
ATOM	318	N	ASN	A	43	40.447	54.784	22.224	1.00	10.77	N
ATOM	319	CA	ASN	A	43	39.195	54.235	22.777	1.00	11.32	C
ATOM	320	C	ASN	A	43	38.355	55.353	23.405	1.00	10.62	C
ATOM	321	O	ASN	A	43	37.122	55.366	23.273	1.00	11.20	O
ATOM	322	CB	ASN	A	43	39.496	53.183	23.852	1.00	12.15	C
ATOM	323	CG	ASN	A	43	39.949	51.857	23.276	1.00	12.70	C
ATOM	324	OD1	ASN	A	43	40.171	51.725	22.076	1.00	12.64	O
ATOM	325	ND2	ASN	A	43	40.097	50.857	24.148	1.00	13.84	N
ATOM	326	N	ARG	A	44	38.995	56.296	24.086	1.00	12.55	N
ATOM	327	CA	ARG	A	44	38.215	57.357	24.708	1.00	11.86	C
ATOM	328	C	ARG	A	44	37.616	58.242	23.623	1.00	11.98	C
ATOM	329	O	ARG	A	44	36.519	58.762	23.783	1.00	11.96	O
ATOM	330	CB	ARG	A	44	39.058	58.185	25.692	1.00	14.08	C
ATOM	331	CG	ARG	A	44	38.181	58.985	26.669	1.00	14.07	C
ATOM	332	CD	ARG	A	44	38.976	59.656	27.801	1.00	14.89	C
ATOM	333	NE	ARG	A	44	39.897	60.637	27.248	1.00	15.41	N
ATOM	334	CZ	ARG	A	44	40.726	61.377	27.969	1.00	17.24	C
ATOM	335	NH1	ARG	A	44	40.749	61.247	29.294	1.00	16.70	N
ATOM	336	NH2	ARG	A	44	41.546	62.238	27.368	1.00	16.95	N
ATOM	337	N	SER	A	45	38.329	58.415	22.514	1.00	11.56	N
ATOM	338	CA	SER	A	45	37.789	59.222	21.423	1.00	11.32	C
ATOM	339	C	SER	A	45	36.497	58.548	20.943	1.00	12.31	C
ATOM	340	O	SER	A	45	35.497	59.217	20.706	1.00	12.94	O
ATOM	341	CB	SER	A	45	38.802	59.311	20.285	1.00	12.44	C
ATOM	342	OG	SER	A	45	38.282	60.078	19.218	1.00	12.22	O

For Fig 3D

ATOM	343	N	ALA	A	46	36.531	57.225	20.823	1.00	11.30	N
ATOM	344	CA	ALA	A	46	35.367	56.460	20.386	1.00	11.57	C
ATOM	345	C	ALA	A	46	34.210	56.658	21.349	1.00	12.22	C
ATOM	346	O	ALA	A	46	33.069	56.887	20.930	1.00	13.03	O
ATOM	347	CB	ALA	A	46	35.727	54.953	20.298	1.00	11.82	C
ATOM	348	N	ALA	A	47	34.498	56.567	22.644	1.00	12.05	N
ATOM	349	CA	ALA	A	47	33.446	56.730	23.649	1.00	12.18	C
ATOM	350	C	ALA	A	47	32.852	58.148	23.579	1.00	13.09	C
ATOM	351	O	ALA	A	47	31.622	58.319	23.630	1.00	13.68	O
ATOM	352	CB	ALA	A	47	34.007	56.432	25.028	1.00	14.12	C
ATOM	353	N	TYR	A	48	33.704	59.164	23.453	1.00	11.89	N
ATOM	354	CA	TYR	A	48	33.198	60.542	23.341	1.00	12.85	C
ATOM	355	C	TYR	A	48	32.345	60.700	22.076	1.00	12.72	C
ATOM	356	O	TYR	A	48	31.306	61.396	22.082	1.00	12.92	O
ATOM	357	CB	TYR	A	48	34.361	61.542	23.320	1.00	13.56	C
ATOM	358	CG	TYR	A	48	34.871	61.903	24.706	1.00	13.75	C
ATOM	359	CD1	TYR	A	48	33.993	62.361	25.700	1.00	17.02	C
ATOM	360	CD2	TYR	A	48	36.221	61.828	25.012	1.00	16.18	C
ATOM	361	CE1	TYR	A	48	34.467	62.735	26.953	1.00	19.20	C
ATOM	362	CE2	TYR	A	48	36.695	62.203	26.269	1.00	16.49	C
ATOM	363	CZ	TYR	A	48	35.822	62.649	27.222	1.00	18.39	C
ATOM	364	OH	TYR	A	48	36.310	63.001	28.473	1.00	20.86	O
ATOM	365	N	ALA	A	49	32.763	60.068	20.986	1.00	12.91	N
ATOM	366	CA	ALA	A	49	31.989	60.159	19.747	1.00	14.07	C
ATOM	367	C	ALA	A	49	30.626	59.493	19.940	1.00	14.82	C
ATOM	368	O	ALA	A	49	29.610	59.988	19.453	1.00	14.32	O
ATOM	369	CB	ALA	A	49	32.745	59.509	18.573	1.00	15.08	C
ATOM	370	N	LYS	A	50	30.597	58.364	20.647	1.00	15.20	N
ATOM	371	CA	LYS	A	50	29.320	57.687	20.888	1.00	17.22	C
ATOM	372	C	LYS	A	50	28.419	58.539	21.773	1.00	17.50	C
ATOM	373	O	LYS	A	50	27.199	58.575	21.595	1.00	17.44	O
ATOM	374	CB	LYS	A	50	29.560	56.325	21.544	1.00	18.89	C
ATOM	375	CG	LYS	A	50	30.109	55.288	20.595	1.00	22.30	C
ATOM	376	CD	LYS	A	50	30.540	54.035	21.362	1.00	27.19	C
ATOM	377	CE	LYS	A	50	31.187	53.017	20.437	1.00	28.98	C
ATOM	378	NZ	LYS	A	50	30.275	52.497	19.360	1.00	29.48	N
ATOM	379	N	LYS	A	51	29.019	59.237	22.722	1.00	17.58	N
ATOM	380	CA	LYS	A	51	28.296	60.112	23.640	1.00	18.21	C
ATOM	381	C	LYS	A	51	27.774	61.354	22.939	1.00	19.08	C
ATOM	382	O	LYS	A	51	26.808	61.978	23.386	1.00	20.94	O
ATOM	383	CB	LYS	A	51	29.242	60.542	24.762	1.00	19.90	C
ATOM	384	CG	LYS	A	51	28.658	61.549	25.726	1.00	24.08	C
ATOM	385	CD	LYS	A	51	29.581	61.774	26.914	1.00	26.40	C
ATOM	386	CE	LYS	A	51	28.895	62.634	27.967	1.00	31.04	C
ATOM	387	NZ	LYS	A	51	29.715	62.784	29.210	1.00	33.99	N
ATOM	388	N	GLY	A	52	28.444	61.727	21.861	1.00	16.67	N
ATOM	389	CA	GLY	A	52	28.063	62.907	21.118	1.00	16.44	C
ATOM	390	C	GLY	A	52	28.851	64.143	21.508	1.00	18.47	C
ATOM	391	O	GLY	A	52	28.405	65.250	21.232	1.00	19.63	O
ATOM	392	N	ASP	A	53	30.011	63.977	22.149	1.00	17.10	N
ATOM	393	CA	ASP	A	53	30.833	65.132	22.501	1.00	16.91	C
ATOM	394	C	ASP	A	53	31.948	65.079	21.475	1.00	16.60	C
ATOM	395	O	ASP	A	53	33.024	64.514	21.707	1.00	15.99	O
ATOM	396	CB	ASP	A	53	31.444	65.022	23.895	1.00	17.51	C
ATOM	397	CG	ASP	A	53	32.191	66.288	24.287	1.00	18.26	C
ATOM	398	OD1	ASP	A	53	32.722	66.971	23.370	1.00	17.40	O
ATOM	399	OD2	ASP	A	53	32.252	66.590	25.500	1.00	18.17	O
ATOM	400	N	TYR	A	54	31.673	65.663	20.322	1.00	15.27	N
ATOM	401	CA	TYR	A	54	32.615	65.603	19.240	1.00	14.91	C

59/137

Forb. Fig 3D

ATOM	402	C	TYR	A	54	33.886	66.412	19.425	1.00	14.60	C
ATOM	403	O	TYR	A	54	34.906	66.063	18.861	1.00	14.26	O
ATOM	404	CB	TYR	A	54	31.906	65.968	17.948	1.00	14.24	C
ATOM	405	CG	TYR	A	54	30.676	65.114	17.745	1.00	15.33	C
ATOM	406	CD1	TYR	A	54	30.749	63.728	17.834	1.00	14.20	C
ATOM	407	CD2	TYR	A	54	29.447	65.693	17.476	1.00	15.07	C
ATOM	408	CE1	TYR	A	54	29.617	62.922	17.660	1.00	14.32	C
ATOM	409	CE2	TYR	A	54	28.312	64.904	17.300	1.00	15.92	C
ATOM	410	CZ	TYR	A	54	28.405	63.525	17.392	1.00	17.08	C
ATOM	411	OH	TYR	A	54	27.278	62.749	17.216	1.00	18.73	O
ATOM	412	N	GLN	A	55	33.832	67.485	20.211	1.00	15.28	N
ATOM	413	CA	GLN	A	55	35.052	68.254	20.452	1.00	15.14	C
ATOM	414	C	GLN	A	55	36.035	67.386	21.239	1.00	13.84	C
ATOM	415	O	GLN	A	55	37.226	67.310	20.914	1.00	12.68	O
ATOM	416	CB	GLN	A	55	34.728	69.531	21.235	1.00	15.29	C
ATOM	417	CG	GLN	A	55	35.946	70.336	21.665	1.00	17.68	C
ATOM	418	CD	GLN	A	55	36.838	70.743	20.508	1.00	19.14	C
ATOM	419	OE1	GLN	A	55	36.365	71.024	19.398	1.00	21.28	O
ATOM	420	NE2	GLN	A	55	38.148	70.795	20.767	1.00	21.95	N
ATOM	421	N	LYS	A	56	35.552	66.716	22.279	1.00	13.08	N
ATOM	422	CA	LYS	A	56	36.459	65.851	23.033	1.00	13.12	C
ATOM	423	C	LYS	A	56	36.894	64.638	22.202	1.00	12.05	C
ATOM	424	O	LYS	A	56	38.033	64.195	22.303	1.00	13.16	O
ATOM	425	CB	LYS	A	56	35.826	65.424	24.350	1.00	13.77	C
ATOM	426	CG	LYS	A	56	35.868	66.553	25.388	1.00	15.71	C
ATOM	427	CD	LYS	A	56	35.303	66.097	26.707	1.00	21.10	C
ATOM	428	CE	LYS	A	56	35.419	67.185	27.769	1.00	23.38	C
ATOM	429	NZ	LYS	A	56	36.838	67.522	28.052	1.00	25.83	N
ATOM	430	N	ALA	A	57	36.006	64.103	21.368	1.00	12.84	N
ATOM	431	CA	ALA	A	57	36.400	62.976	20.509	1.00	11.98	C
ATOM	432	C	ALA	A	57	37.550	63.439	19.621	1.00	13.81	C
ATOM	433	O	ALA	A	57	38.521	62.706	19.361	1.00	13.07	O
ATOM	434	CB	ALA	A	57	35.210	62.528	19.631	1.00	12.91	C
ATOM	435	N	TYR	A	58	37.429	64.672	19.134	1.00	12.90	N
ATOM	436	CA	TYR	A	58	38.457	65.243	18.275	1.00	13.16	C
ATOM	437	C	TYR	A	58	39.780	65.405	19.022	1.00	13.72	C
ATOM	438	O	TYR	A	58	40.835	65.032	18.513	1.00	13.66	O
ATOM	439	CB	TYR	A	58	38.006	66.609	17.765	1.00	13.34	C
ATOM	440	CG	TYR	A	58	39.053	67.318	16.953	1.00	15.44	C
ATOM	441	CD1	TYR	A	58	39.515	66.781	15.750	1.00	13.51	C
ATOM	442	CD2	TYR	A	58	39.585	68.528	17.380	1.00	15.86	C
ATOM	443	CE1	TYR	A	58	40.493	67.455	14.983	1.00	15.85	C
ATOM	444	CE2	TYR	A	58	40.551	69.193	16.634	1.00	16.88	C
ATOM	445	CZ	TYR	A	58	40.996	68.659	15.442	1.00	15.82	C
ATOM	446	OH	TYR	A	58	41.943	69.356	14.703	1.00	18.56	O
ATOM	447	N	GLU	A	59	39.723	65.974	20.218	1.00	14.43	N
ATOM	448	CA	GLU	A	59	40.950	66.177	20.990	1.00	14.23	C
ATOM	449	C	GLU	A	59	41.677	64.857	21.231	1.00	13.59	C
ATOM	450	O	GLU	A	59	42.904	64.784	21.118	1.00	13.32	O
ATOM	451	CB	GLU	A	59	40.622	66.837	22.324	1.00	15.37	C
ATOM	452	CG	GLU	A	59	40.099	68.245	22.157	1.00	20.12	C
ATOM	453	CD	GLU	A	59	39.552	68.842	23.441	1.00	20.86	C
ATOM	454	OE1	GLU	A	59	39.484	68.134	24.472	1.00	25.62	O
ATOM	455	OE2	GLU	A	59	39.187	70.039	23.415	1.00	26.04	O
ATOM	456	N	ASP	A	60	40.928	63.814	21.584	1.00	13.50	N
ATOM	457	CA	ASP	A	60	41.532	62.514	21.818	1.00	12.90	C
ATOM	458	C	ASP	A	60	42.059	61.873	20.531	1.00	13.23	C
ATOM	459	O	ASP	A	60	43.044	61.147	20.566	1.00	12.91	O
ATOM	460	CB	ASP	A	60	40.541	61.583	22.523	1.00	14.13	C

1/137

Form. Fig 3D

ATOM	461	CG	ASP	A	60	40.432	61.867	24.011	1.00	16.85	C
ATOM	462	OD1	ASP	A	60	41.325	62.545	24.568	1.00	18.53	O
ATOM	463	OD2	ASP	A	60	39.460	61.391	24.637	1.00	16.77	O
ATOM	464	N	GLY	A	61	41.387	62.122	19.405	1.00	11.96	N
ATOM	465	CA	GLY	A	61	41.867	61.603	18.138	1.00	12.43	C
ATOM	466	C	GLY	A	61	43.185	62.298	17.821	1.00	13.35	C
ATOM	467	O	GLY	A	61	44.119	61.659	17.344	1.00	13.32	O
ATOM	468	N	CYS	A	62	43.257	63.611	18.071	1.00	13.03	N
ATOM	469	CA	CYS	A	62	44.511	64.348	17.835	1.00	13.36	C
ATOM	470	C	CYS	A	62	45.642	63.806	18.692	1.00	12.86	C
ATOM	471	O	CYS	A	62	46.782	63.657	18.233	1.00	12.88	O
ATOM	472	CB	CYS	A	62	44.338	65.837	18.150	1.00	14.06	C
ATOM	473	SG	CYS	A	62	43.339	66.751	16.965	1.00	15.47	S
ATOM	474	N	LYS	A	63	45.349	63.525	19.954	1.00	14.14	N
ATOM	475	CA	LYS	A	63	46.372	62.999	20.850	1.00	14.02	C
ATOM	476	C	LYS	A	63	46.836	61.621	20.371	1.00	14.80	C
ATOM	477	O	LYS	A	63	48.021	61.285	20.484	1.00	14.46	O
ATOM	478	CB	LYS	A	63	45.826	62.901	22.276	1.00	15.54	C
ATOM	479	CG	LYS	A	63	46.851	62.401	23.279	1.00	20.70	C
ATOM	480	CD	LYS	A	63	47.913	63.444	23.527	1.00	24.64	C
ATOM	481	CE	LYS	A	63	48.822	63.021	24.668	1.00	27.32	C
ATOM	482	NZ	LYS	A	63	49.754	64.123	25.051	1.00	29.38	N
ATOM	483	N	THR	A	64	45.914	60.828	19.823	1.00	11.94	N
ATOM	484	CA	THR	A	64	46.275	59.489	19.340	1.00	11.98	C
ATOM	485	C	THR	A	64	47.290	59.635	18.210	1.00	12.58	C
ATOM	486	O	THR	A	64	48.307	58.944	18.192	1.00	12.72	O
ATOM	487	CB	THR	A	64	45.033	58.717	18.825	1.00	12.46	C
ATOM	488	OG1	THR	A	64	44.050	58.647	19.869	1.00	11.85	O
ATOM	489	CG2	THR	A	64	45.415	57.287	18.429	1.00	12.95	C
ATOM	490	N	VAL	A	65	47.018	60.547	17.276	1.00	12.52	N
ATOM	491	CA	VAL	A	65	47.931	60.776	16.149	1.00	13.68	C
ATOM	492	C	VAL	A	65	49.279	61.322	16.649	1.00	14.14	C
ATOM	493	O	VAL	A	65	50.340	60.897	16.156	1.00	15.75	O
ATOM	494	CB	VAL	A	65	47.316	61.774	15.171	1.00	12.97	C
ATOM	495	CG1	VAL	A	65	48.339	62.148	14.088	1.00	14.09	C
ATOM	496	CG2	VAL	A	65	46.059	61.139	14.509	1.00	14.06	C
ATOM	497	N	ASP	A	66	49.237	62.249	17.618	1.00	14.34	N
ATOM	498	CA	ASP	A	66	50.470	62.838	18.185	1.00	15.61	C
ATOM	499	C	ASP	A	66	51.375	61.753	18.783	1.00	16.12	C
ATOM	500	O	ASP	A	66	52.603	61.748	18.598	1.00	17.09	O
ATOM	501	CB	ASP	A	66	50.142	63.840	19.309	1.00	16.60	C
ATOM	502	CG	ASP	A	66	49.563	65.157	18.801	1.00	18.42	C
ATOM	503	OD1	ASP	A	66	49.525	65.369	17.581	1.00	21.21	O
ATOM	504	OD2	ASP	A	66	49.131	65.998	19.634	1.00	20.94	O
ATOM	505	N	LEU	A	67	50.763	60.823	19.503	1.00	14.50	N
ATOM	506	CA	LEU	A	67	51.505	59.746	20.148	1.00	15.58	C
ATOM	507	C	LEU	A	67	52.003	58.656	19.213	1.00	16.66	C
ATOM	508	O	LEU	A	67	53.140	58.155	19.340	1.00	18.01	O
ATOM	509	CB	LEU	A	67	50.619	59.095	21.213	1.00	16.43	C
ATOM	510	CG	LEU	A	67	50.333	59.994	22.420	1.00	15.79	C
ATOM	511	CD1	LEU	A	67	49.226	59.401	23.279	1.00	16.11	C
ATOM	512	CD2	LEU	A	67	51.627	60.132	23.246	1.00	17.34	C
ATOM	513	N	LYS	A	68	51.175	58.316	18.237	1.00	14.95	N
ATOM	514	CA	LYS	A	68	51.484	57.206	17.353	1.00	14.66	C
ATOM	515	C	LYS	A	68	51.157	57.602	15.928	1.00	14.88	C
ATOM	516	O	LYS	A	68	50.185	57.141	15.338	1.00	13.72	O
ATOM	517	CB	LYS	A	68	50.616	56.024	17.802	1.00	15.39	C
ATOM	518	CG	LYS	A	68	51.039	54.664	17.334	1.00	17.91	C
ATOM	519	CD	LYS	A	68	52.226	54.170	18.138	1.00	18.20	C

Form. Fig 3D

ATOM	520	CE	LYS	A	68	52.595	52.755	17.752	1.00	20.53	C
ATOM	521	NZ	LYS	A	68	53.941	52.430	18.316	1.00	20.09	N
ATOM	522	N	PRO	A	69	51.985	58.464	15.340	1.00	15.37	N
ATOM	523	CA	PRO	A	69	51.694	58.884	13.971	1.00	15.49	C
ATOM	524	C	PRO	A	69	51.680	57.819	12.889	1.00	14.35	C
ATOM	525	O	PRO	A	69	51.134	58.050	11.819	1.00	15.78	O
ATOM	526	CB	PRO	A	69	52.723	59.996	13.723	1.00	16.67	C
ATOM	527	CG	PRO	A	69	53.858	59.605	14.597	1.00	16.62	C
ATOM	528	CD	PRO	A	69	53.227	59.073	15.850	1.00	16.48	C
ATOM	529	N	ASP	A	70	52.275	56.653	13.136	1.00	14.88	N
ATOM	530	CA	ASP	A	70	52.239	55.632	12.114	1.00	14.97	C
ATOM	531	C	ASP	A	70	50.960	54.827	12.143	1.00	15.87	C
ATOM	532	O	ASP	A	70	50.707	54.064	11.224	1.00	18.91	O
ATOM	533	CB	ASP	A	70	53.404	54.654	12.243	1.00	16.47	C
ATOM	534	CG	ASP	A	70	54.641	55.099	11.495	1.00	18.67	C
ATOM	535	OD1	ASP	A	70	54.576	55.990	10.617	1.00	15.35	O
ATOM	536	OD2	ASP	A	70	55.700	54.506	11.782	1.00	19.01	O
ATOM	537	N	TRP	A	71	50.146	54.993	13.184	1.00	15.61	N
ATOM	538	CA	TRP	A	71	48.933	54.194	13.292	1.00	14.63	C
ATOM	539	C	TRP	A	71	47.734	54.813	12.575	1.00	15.30	C
ATOM	540	O	TRP	A	71	47.214	55.856	12.977	1.00	15.39	O
ATOM	541	CB	TRP	A	71	48.619	53.962	14.774	1.00	13.32	C
ATOM	542	CG	TRP	A	71	47.577	52.907	15.000	1.00	15.32	C
ATOM	543	CD1	TRP	A	71	47.527	51.666	14.431	1.00	14.05	C
ATOM	544	CD2	TRP	A	71	46.502	52.962	15.943	1.00	17.24	C
ATOM	545	NE1	TRP	A	71	46.485	50.943	14.969	1.00	16.65	N
ATOM	546	CE2	TRP	A	71	45.846	51.715	15.903	1.00	15.24	C
ATOM	547	CE3	TRP	A	71	46.036	53.944	16.827	1.00	18.73	C
ATOM	548	CZ2	TRP	A	71	44.748	51.422	16.717	1.00	17.92	C
ATOM	549	CZ3	TRP	A	71	44.941	53.649	17.637	1.00	19.76	C
ATOM	550	CH2	TRP	A	71	44.316	52.398	17.574	1.00	18.57	C
ATOM	551	N	GLY	A	72	47.295	54.152	11.509	1.00	15.37	N
ATOM	552	CA	GLY	A	72	46.194	54.690	10.736	1.00	14.95	C
ATOM	553	C	GLY	A	72	44.916	54.956	11.491	1.00	14.89	C
ATOM	554	O	GLY	A	72	44.220	55.945	11.229	1.00	14.42	O
ATOM	555	N	LYS	A	73	44.595	54.091	12.443	1.00	15.50	N
ATOM	556	CA	LYS	A	73	43.320	54.242	13.143	1.00	15.99	C
ATOM	557	C	LYS	A	73	43.186	55.540	13.903	1.00	15.83	C
ATOM	558	O	LYS	A	73	42.079	56.048	14.088	1.00	14.51	O
ATOM	559	CB	LYS	A	73	43.094	53.039	14.063	1.00	17.49	C
ATOM	560	CG	LYS	A	73	41.682	52.887	14.527	1.00	17.33	C
ATOM	561	CD	LYS	A	73	41.470	51.482	15.145	1.00	18.85	C
ATOM	562	CE	LYS	A	73	40.054	51.275	15.530	1.00	19.11	C
ATOM	563	NZ	LYS	A	73	39.871	49.948	16.210	1.00	16.05	N
ATOM	564	N	GLY	A	74	44.310	56.107	14.344	1.00	13.59	N
ATOM	565	CA	GLY	A	74	44.254	57.365	15.043	1.00	14.78	C
ATOM	566	C	GLY	A	74	43.734	58.458	14.126	1.00	12.59	C
ATOM	567	O	GLY	A	74	42.982	59.334	14.552	1.00	12.70	O
ATOM	568	N	TYR	A	75	44.149	58.420	12.860	1.00	13.09	N
ATOM	569	CA	TYR	A	75	43.682	59.412	11.907	1.00	12.32	C
ATOM	570	C	TYR	A	75	42.183	59.183	11.673	1.00	11.76	C
ATOM	571	O	TYR	A	75	41.447	60.125	11.451	1.00	12.82	O
ATOM	572	CB	TYR	A	75	44.439	59.291	10.584	1.00	12.68	C
ATOM	573	CG	TYR	A	75	45.911	59.577	10.731	1.00	11.75	C
ATOM	574	CD1	TYR	A	75	46.411	60.851	10.520	1.00	12.32	C
ATOM	575	CD2	TYR	A	75	46.786	58.571	11.134	1.00	14.80	C
ATOM	576	CE1	TYR	A	75	47.776	61.139	10.717	1.00	12.31	C
ATOM	577	CE2	TYR	A	75	48.152	58.837	11.329	1.00	13.19	C
ATOM	578	CZ	TYR	A	75	48.624	60.131	11.121	1.00	12.93	C

Forb. Fig 3D

ATOM	579	OH	TYR	A	75	49.970	60.401	11.355	1.00	13.45	O
ATOM	580	N	SER	A	76	41.741	57.930	11.686	1.00	12.98	N
ATOM	581	CA	SER	A	76	40.305	57.681	11.522	1.00	12.83	C
ATOM	582	C	SER	A	76	39.557	58.291	12.705	1.00	13.08	C
ATOM	583	O	SER	A	76	38.486	58.859	12.535	1.00	12.70	O
ATOM	584	CB	SER	A	76	40.023	56.182	11.433	1.00	16.85	C
ATOM	585	OG	SER	A	76	40.445	55.690	10.172	1.00	22.01	O
ATOM	586	N	ARG	A	77	40.107	58.175	13.916	1.00	12.71	N
ATOM	587	CA	ARG	A	77	39.442	58.766	15.076	1.00	13.04	C
ATOM	588	C	ARG	A	77	39.329	60.267	14.892	1.00	12.58	C
ATOM	589	O	ARG	A	77	38.282	60.855	15.121	1.00	12.64	O
ATOM	590	CB	ARG	A	77	40.248	58.565	16.366	1.00	13.37	C
ATOM	591	CG	ARG	A	77	40.322	57.149	16.915	1.00	12.27	C
ATOM	592	CD	ARG	A	77	38.934	56.579	17.173	1.00	12.23	C
ATOM	593	NE	ARG	A	77	39.016	55.212	17.668	1.00	13.22	N
ATOM	594	CZ	ARG	A	77	38.022	54.329	17.609	1.00	13.06	C
ATOM	595	NH1	ARG	A	77	36.852	54.672	17.063	1.00	12.50	N
ATOM	596	NH2	ARG	A	77	38.191	53.108	18.113	1.00	12.48	N
ATOM	597	N	LYS	A	78	40.460	60.891	14.555	1.00	11.22	N
ATOM	598	CA	LYS	A	78	40.505	62.332	14.361	1.00	12.89	C
ATOM	599	C	LYS	A	78	39.561	62.780	13.250	1.00	13.04	C
ATOM	600	O	LYS	A	78	38.789	63.734	13.423	1.00	14.52	O
ATOM	601	CB	LYS	A	78	41.951	62.765	14.035	1.00	11.47	C
ATOM	602	CG	LYS	A	78	42.143	64.278	13.948	1.00	14.14	C
ATOM	603	CD	LYS	A	78	43.598	64.648	13.660	1.00	16.90	C
ATOM	604	CE	LYS	A	78	43.747	66.141	13.428	1.00	15.64	C
ATOM	605	NZ	LYS	A	78	45.192	66.497	13.251	1.00	19.73	N
ATOM	606	N	ALA	A	79	39.627	62.099	12.115	1.00	12.71	N
ATOM	607	CA	ALA	A	79	38.813	62.452	10.964	1.00	13.08	C
ATOM	608	C	ALA	A	79	37.335	62.227	11.212	1.00	13.00	C
ATOM	609	O	ALA	A	79	36.527	63.016	10.757	1.00	13.64	O
ATOM	610	CB	ALA	A	79	39.260	61.671	9.749	1.00	12.86	C
ATOM	611	N	ALA	A	80	36.984	61.171	11.936	1.00	12.28	N
ATOM	612	CA	ALA	A	80	35.561	60.937	12.184	1.00	12.68	C
ATOM	613	C	ALA	A	80	35.009	62.083	13.022	1.00	13.19	C
ATOM	614	O	ALA	A	80	33.886	62.550	12.786	1.00	12.11	O
ATOM	615	CB	ALA	A	80	35.338	59.607	12.906	1.00	12.89	C
ATOM	616	N	ALA	A	81	35.796	62.523	14.001	1.00	13.21	N
ATOM	617	CA	ALA	A	81	35.380	63.623	14.872	1.00	11.96	C
ATOM	618	C	ALA	A	81	35.228	64.889	14.031	1.00	12.40	C
ATOM	619	O	ALA	A	81	34.293	65.650	14.221	1.00	12.71	O
ATOM	620	CB	ALA	A	81	36.408	63.841	15.970	1.00	13.63	C
ATOM	621	N	LEU	A	82	36.158	65.121	13.106	1.00	12.32	N
ATOM	622	CA	LEU	A	82	36.030	66.294	12.247	1.00	12.07	C
ATOM	623	C	LEU	A	82	34.754	66.236	11.392	1.00	12.43	C
ATOM	624	O	LEU	A	82	34.122	67.264	11.161	1.00	13.90	O
ATOM	625	CB	LEU	A	82	37.267	66.423	11.349	1.00	12.93	C
ATOM	626	CG	LEU	A	82	38.510	66.886	12.128	1.00	12.75	C
ATOM	627	CD1	LEU	A	82	39.761	66.613	11.296	1.00	14.19	C
ATOM	628	CD2	LEU	A	82	38.408	68.375	12.429	1.00	15.26	C
ATOM	629	N	GLU	A	83	34.389	65.051	10.909	1.00	12.85	N
ATOM	630	CA	GLU	A	83	33.168	64.911	10.105	1.00	13.56	C
ATOM	631	C	GLU	A	83	31.960	65.279	10.965	1.00	15.28	C
ATOM	632	O	GLU	A	83	31.071	66.022	10.516	1.00	16.06	O
ATOM	633	CB	GLU	A	83	33.022	63.484	9.575	1.00	13.82	C
ATOM	634	CG	GLU	A	83	34.089	63.132	8.524	1.00	14.93	C
ATOM	635	CD	GLU	A	83	33.780	61.828	7.797	1.00	21.01	C
ATOM	636	OE1	GLU	A	83	32.576	61.555	7.582	1.00	25.38	O
ATOM	637	OE2	GLU	A	83	34.720	61.100	7.415	1.00	21.36	O

Forb. Fig 3D

ATOM	638	N	PHE	A	84	31.907	64.749	12.180	1.00	14.42	N
ATOM	639	CA	PHE	A	84	30.794	65.065	13.085	1.00	15.43	C
ATOM	640	C	PHE	A	84	30.761	66.574	13.340	1.00	15.75	C
ATOM	641	O	PHE	A	84	29.686	67.176	13.508	1.00	16.66	O
ATOM	642	CB	PHE	A	84	30.967	64.357	14.424	1.00	14.86	C
ATOM	643	CG	PHE	A	84	30.550	62.919	14.424	1.00	15.98	C
ATOM	644	CD1	PHE	A	84	31.467	61.915	14.741	1.00	17.09	C
ATOM	645	CD2	PHE	A	84	29.223	62.569	14.186	1.00	17.56	C
ATOM	646	CE1	PHE	A	84	31.071	60.581	14.828	1.00	17.77	C
ATOM	647	CE2	PHE	A	84	28.806	61.233	14.269	1.00	18.77	C
ATOM	648	CZ	PHE	A	84	29.734	60.232	14.593	1.00	19.00	C
ATOM	649	N	LEU	A	85	31.947	67.182	13.388	1.00	15.89	N
ATOM	650	CA	LEU	A	85	32.068	68.625	13.620	1.00	15.13	C
ATOM	651	C	LEU	A	85	31.798	69.445	12.358	1.00	15.71	C
ATOM	652	O	LEU	A	85	31.884	70.673	12.368	1.00	16.45	O
ATOM	653	CB	LEU	A	85	33.470	68.959	14.147	1.00	15.43	C
ATOM	654	CG	LEU	A	85	33.764	68.500	15.581	1.00	16.13	C
ATOM	655	CD1	LEU	A	85	35.245	68.695	15.859	1.00	14.61	C
ATOM	656	CD2	LEU	A	85	32.939	69.280	16.574	1.00	15.28	C
ATOM	657	N	ASN	A	86	31.473	68.753	11.270	1.00	17.02	N
ATOM	658	CA	ASN	A	86	31.180	69.396	9.993	1.00	18.06	C
ATOM	659	C	ASN	A	86	32.368	70.186	9.466	1.00	18.38	C
ATOM	660	O	ASN	A	86	32.224	71.246	8.866	1.00	19.86	O
ATOM	661	CB	ASN	A	86	29.915	70.270	10.117	1.00	18.64	C
ATOM	662	CG	ASN	A	86	28.675	69.432	10.399	1.00	21.76	C
ATOM	663	OD1	ASN	A	86	28.569	68.298	9.918	1.00	23.33	O
ATOM	664	ND2	ASN	A	86	27.727	69.980	11.162	1.00	22.24	N
ATOM	665	N	ARG	A	87	33.552	69.640	9.711	1.00	17.48	N
ATOM	666	CA	ARG	A	87	34.814	70.214	9.258	1.00	17.10	C
ATOM	667	C	ARG	A	87	35.368	69.196	8.270	1.00	17.86	C
ATOM	668	O	ARG	A	87	36.369	68.522	8.506	1.00	16.95	O
ATOM	669	CB	ARG	A	87	35.725	70.424	10.467	1.00	18.70	C
ATOM	670	CG	ARG	A	87	35.242	71.613	11.321	1.00	16.31	C
ATOM	671	CD	ARG	A	87	35.838	71.651	12.714	1.00	18.58	C
ATOM	672	NE	ARG	A	87	37.299	71.780	12.726	1.00	18.01	N
ATOM	673	CZ	ARG	A	87	38.021	71.845	13.844	1.00	18.21	C
ATOM	674	NH1	ARG	A	87	37.421	71.803	15.029	1.00	20.14	N
ATOM	675	NH2	ARG	A	87	39.344	71.920	13.790	1.00	19.30	N
ATOM	676	N	PHE	A	88	34.676	69.091	7.145	1.00	17.70	N
ATOM	677	CA	PHE	A	88	35.002	68.133	6.113	1.00	18.87	C
ATOM	678	C	PHE	A	88	36.300	68.338	5.352	1.00	19.33	C
ATOM	679	O	PHE	A	88	36.929	67.364	4.938	1.00	19.98	O
ATOM	680	CB	PHE	A	88	33.807	68.029	5.167	1.00	19.09	C
ATOM	681	CG	PHE	A	88	32.541	67.599	5.865	1.00	21.35	C
ATOM	682	CD1	PHE	A	88	32.383	66.283	6.303	1.00	23.32	C
ATOM	683	CD2	PHE	A	88	31.527	68.515	6.118	1.00	23.60	C
ATOM	684	CE1	PHE	A	88	31.229	65.889	6.981	1.00	22.46	C
ATOM	685	CE2	PHE	A	88	30.359	68.124	6.804	1.00	23.86	C
ATOM	686	CZ	PHE	A	88	30.216	66.819	7.230	1.00	23.66	C
ATOM	687	N	GLU	A	89	36.702	69.589	5.157	1.00	20.75	N
ATOM	688	CA	GLU	A	89	37.953	69.832	4.456	1.00	21.51	C
ATOM	689	C	GLU	A	89	39.096	69.303	5.301	1.00	19.45	C
ATOM	690	O	GLU	A	89	40.024	68.680	4.793	1.00	18.26	O
ATOM	691	CB	GLU	A	89	38.126	71.324	4.181	1.00	25.35	C
ATOM	692	CG	GLU	A	89	37.271	71.772	3.027	1.00	32.54	C
ATOM	693	CD	GLU	A	89	37.400	70.824	1.839	1.00	35.49	C
ATOM	694	OE1	GLU	A	89	38.535	70.650	1.325	1.00	38.50	O
ATOM	695	OE2	GLU	A	89	36.367	70.247	1.419	1.00	40.15	O
ATOM	696	N	GLU	A	90	39.008	69.545	6.601	1.00	17.65	N

Forb. Fig 3D

ATOM	697	CA	GLU	A	90	40.031	69.055	7.523	1.00	17.03	C
ATOM	698	C	GLU	A	90	39.947	67.541	7.641	1.00	15.96	C
ATOM	699	O	GLU	A	90	40.971	66.867	7.740	1.00	15.09	O
ATOM	700	CB	GLU	A	90	39.872	69.698	8.899	1.00	16.37	C
ATOM	701	CG	GLU	A	90	40.202	71.191	8.919	1.00	18.65	C
ATOM	702	CD	GLU	A	90	39.753	71.855	10.200	1.00	21.24	C
ATOM	703	OE1	GLU	A	90	40.533	71.898	11.185	1.00	22.12	O
ATOM	704	OE2	GLU	A	90	38.599	72.327	10.230	1.00	21.78	O
ATOM	705	N	ALA	A	91	38.734	66.998	7.650	1.00	15.75	N
ATOM	706	CA	ALA	A	91	38.595	65.553	7.723	1.00	15.15	C
ATOM	707	C	ALA	A	91	39.306	64.921	6.517	1.00	15.00	C
ATOM	708	O	ALA	A	91	40.045	63.941	6.651	1.00	15.46	O
ATOM	709	CB	ALA	A	91	37.090	65.148	7.736	1.00	14.98	C
ATOM	710	N	LYS	A	92	39.085	65.481	5.330	1.00	14.52	N
ATOM	711	CA	LYS	A	92	39.707	64.930	4.135	1.00	15.74	C
ATOM	712	C	LYS	A	92	41.237	64.975	4.245	1.00	16.36	C
ATOM	713	O	LYS	A	92	41.910	63.998	3.937	1.00	15.94	O
ATOM	714	CB	LYS	A	92	39.244	65.712	2.893	1.00	18.40	C
ATOM	715	CG	LYS	A	92	39.901	65.229	1.616	1.00	21.94	C
ATOM	716	CD	LYS	A	92	39.373	65.971	0.395	1.00	26.91	C
ATOM	717	CE	LYS	A	92	40.111	65.532	-0.875	1.00	30.92	C
ATOM	718	NZ	LYS	A	92	39.603	66.267	-2.074	1.00	34.10	N
ATOM	719	N	ARG	A	93	41.774	66.100	4.710	1.00	16.02	N
ATOM	720	CA	ARG	A	93	43.225	66.226	4.840	1.00	17.31	C
ATOM	721	C	ARG	A	93	43.772	65.271	5.895	1.00	16.87	C
ATOM	722	O	ARG	A	93	44.932	64.850	5.817	1.00	16.99	O
ATOM	723	CB	ARG	A	93	43.623	67.667	5.192	1.00	19.09	C
ATOM	724	CG	ARG	A	93	43.405	68.672	4.053	1.00	20.33	C
ATOM	725	CD	ARG	A	93	44.245	69.926	4.266	1.00	19.76	C
ATOM	726	NE	ARG	A	93	43.906	70.652	5.485	1.00	23.18	N
ATOM	727	CZ	ARG	A	93	42.969	71.594	5.561	1.00	23.26	C
ATOM	728	NH1	ARG	A	93	42.266	71.929	4.481	1.00	25.34	N
ATOM	729	NH2	ARG	A	93	42.749	72.209	6.712	1.00	24.22	N
ATOM	730	N	THR	A	94	42.952	64.955	6.893	1.00	15.29	N
ATOM	731	CA	THR	A	94	43.377	64.028	7.938	1.00	15.12	C
ATOM	732	C	THR	A	94	43.473	62.626	7.365	1.00	13.94	C
ATOM	733	O	THR	A	94	44.408	61.890	7.663	1.00	13.63	O
ATOM	734	CB	THR	A	94	42.402	64.060	9.141	1.00	14.47	C
ATOM	735	OG1	THR	A	94	42.455	65.363	9.730	1.00	17.93	O
ATOM	736	CG2	THR	A	94	42.797	63.033	10.207	1.00	15.67	C
ATOM	737	N	TYR	A	95	42.519	62.239	6.530	1.00	13.52	N
ATOM	738	CA	TYR	A	95	42.613	60.931	5.909	1.00	13.54	C
ATOM	739	C	TYR	A	95	43.868	60.905	5.037	1.00	15.47	C
ATOM	740	O	TYR	A	95	44.565	59.900	4.983	1.00	16.39	O
ATOM	741	CB	TYR	A	95	41.385	60.650	5.025	1.00	15.20	C
ATOM	742	CG	TYR	A	95	40.122	60.410	5.817	1.00	14.55	C
ATOM	743	CD1	TYR	A	95	39.001	61.222	5.650	1.00	12.95	C
ATOM	744	CD2	TYR	A	95	40.057	59.363	6.734	1.00	15.61	C
ATOM	745	CE1	TYR	A	95	37.844	60.994	6.394	1.00	15.28	C
ATOM	746	CE2	TYR	A	95	38.917	59.121	7.471	1.00	14.78	C
ATOM	747	CZ	TYR	A	95	37.818	59.941	7.299	1.00	14.85	C
ATOM	748	OH	TYR	A	95	36.707	59.710	8.065	1.00	15.93	O
ATOM	749	N	GLU	A	96	44.130	62.007	4.333	1.00	15.88	N
ATOM	750	CA	GLU	A	96	45.295	62.073	3.461	1.00	16.28	C
ATOM	751	C	GLU	A	96	46.573	62.002	4.269	1.00	16.91	C
ATOM	752	O	GLU	A	96	47.548	61.384	3.840	1.00	17.70	O
ATOM	753	CB	GLU	A	96	45.265	63.359	2.647	1.00	18.33	C
ATOM	754	CG	GLU	A	96	44.115	63.356	1.672	1.00	23.12	C
ATOM	755	CD	GLU	A	96	44.032	64.620	0.860	1.00	26.73	C

Forsk. Fig. 3D

ATOM	756	OE1	GLU	A	96	44.204	65.710	1.441	1.00	27.52	O
ATOM	757	OE2	GLU	A	96	43.786	64.502	-0.362	1.00	30.12	O
ATOM	758	N	GLU	A	97	46.575	62.646	5.427	1.00	17.34	N
ATOM	759	CA	GLU	A	97	47.768	62.647	6.276	1.00	16.58	C
ATOM	760	C	GLU	A	97	48.016	61.221	6.780	1.00	16.95	C
ATOM	761	O	GLU	A	97	49.157	60.752	6.817	1.00	17.17	O
ATOM	762	CB	GLU	A	97	47.570	63.601	7.446	1.00	17.53	C
ATOM	763	CG	GLU	A	97	48.826	63.931	8.241	1.00	19.44	C
ATOM	764	CD	GLU	A	97	49.636	65.051	7.629	1.00	22.69	C
ATOM	765	OE1	GLU	A	97	49.030	66.113	7.346	1.00	21.78	O
ATOM	766	OE2	GLU	A	97	50.872	64.891	7.440	1.00	18.90	O
ATOM	767	N	GLY	A	98	46.943	60.519	7.141	1.00	15.22	N
ATOM	768	CA	GLY	A	98	47.091	59.159	7.627	1.00	16.27	C
ATOM	769	C	GLY	A	98	47.665	58.234	6.566	1.00	16.39	C
ATOM	770	O	GLY	A	98	48.476	57.332	6.844	1.00	15.03	O
ATOM	771	N	LEU	A	99	47.259	58.482	5.329	1.00	15.02	N
ATOM	772	CA	LEU	A	99	47.713	57.666	4.221	1.00	17.66	C
ATOM	773	C	LEU	A	99	49.194	57.863	3.918	1.00	17.82	C
ATOM	774	O	LEU	A	99	49.784	57.041	3.219	1.00	20.33	O
ATOM	775	CB	LEU	A	99	46.833	57.938	2.997	1.00	18.67	C
ATOM	776	CG	LEU	A	99	45.380	57.455	3.146	1.00	20.56	C
ATOM	777	CD1	LEU	A	99	44.527	58.090	2.053	1.00	20.20	C
ATOM	778	CD2	LEU	A	99	45.289	55.946	3.088	1.00	21.01	C
ATOM	779	N	LYS	A	100	49.784	58.947	4.430	1.00	18.10	N
ATOM	780	CA	LYS	A	100	51.222	59.212	4.253	1.00	16.25	C
ATOM	781	C	LYS	A	100	51.964	58.280	5.220	1.00	17.26	C
ATOM	782	O	LYS	A	100	53.186	58.102	5.119	1.00	19.90	O
ATOM	783	CB	LYS	A	100	51.568	60.675	4.582	1.00	16.66	C
ATOM	784	CG	LYS	A	100	50.892	61.713	3.664	1.00	17.64	C
ATOM	785	CD	LYS	A	100	51.326	63.113	4.041	1.00	22.44	C
ATOM	786	CE	LYS	A	100	50.455	64.154	3.376	1.00	24.96	C
ATOM	787	NZ	LYS	A	100	50.206	63.793	1.959	1.00	29.19	N
ATOM	788	N	HIS	A	101	51.228	57.680	6.149	1.00	15.92	N
ATOM	789	CA	HIS	A	101	51.832	56.761	7.117	1.00	17.17	C
ATOM	790	C	HIS	A	101	51.426	55.309	6.915	1.00	18.87	C
ATOM	791	O	HIS	A	101	52.250	54.396	7.097	1.00	19.32	O
ATOM	792	CB	HIS	A	101	51.504	57.210	8.546	1.00	13.97	C
ATOM	793	CG	HIS	A	101	52.226	58.454	8.966	1.00	13.96	C
ATOM	794	ND1	HIS	A	101	53.424	58.420	9.656	1.00	13.62	N
ATOM	795	CD2	HIS	A	101	51.937	59.764	8.781	1.00	13.76	C
ATOM	796	CE1	HIS	A	101	53.836	59.656	9.881	1.00	16.30	C
ATOM	797	NE2	HIS	A	101	52.952	60.493	9.362	1.00	12.48	N
ATOM	798	N	GLU	A	102	50.163	55.088	6.552	1.00	19.48	N
ATOM	799	CA	GLU	A	102	49.643	53.732	6.316	1.00	22.99	C
ATOM	800	C	GLU	A	102	48.848	53.788	5.015	1.00	25.16	C
ATOM	801	O	GLU	A	102	47.621	53.802	5.024	1.00	25.31	O
ATOM	802	CB	GLU	A	102	48.738	53.306	7.473	1.00	24.07	C
ATOM	803	CG	GLU	A	102	48.515	51.801	7.579	1.00	28.95	C
ATOM	804	CD	GLU	A	102	47.670	51.411	8.779	1.00	29.64	C
ATOM	805	OE1	GLU	A	102	47.870	51.984	9.869	1.00	31.93	O
ATOM	806	OE2	GLU	A	102	46.820	50.510	8.647	1.00	32.93	O
ATOM	807	N	ALA	A	103	49.577	53.799	3.904	1.00	27.10	N
ATOM	808	CA	ALA	A	103	49.004	53.926	2.563	1.00	29.86	C
ATOM	809	C	ALA	A	103	47.923	52.943	2.129	1.00	30.89	C
ATOM	810	O	ALA	A	103	47.044	53.286	1.329	1.00	31.77	O
ATOM	811	CB	ALA	A	103	50.130	53.932	1.536	1.00	29.93	C
ATOM	812	N	ASN	A	104	47.964	51.727	2.643	1.00	32.22	N
ATOM	813	CA	ASN	A	104	46.971	50.751	2.231	1.00	33.34	C
ATOM	814	C	ASN	A	104	45.854	50.548	3.239	1.00	32.55	C

Fork-Fing 3D

ATOM	815	O	ASN	A	104	45.092	49.590	3.140	1.00	32.65	O
ATOM	816	CB	ASN	A	104	47.666	49.421	1.925	1.00	36.17	C
ATOM	817	CG	ASN	A	104	48.766	49.573	0.895	1.00	39.17	C
ATOM	818	OD1	ASN	A	104	48.529	50.047	-0.221	1.00	41.69	O
ATOM	819	ND2	ASN	A	104	49.980	49.177	1.263	1.00	41.00	N
ATOM	820	N	ASN	A	105	45.737	51.454	4.205	1.00	30.60	N
ATOM	821	CA	ASN	A	105	44.688	51.322	5.214	1.00	29.72	C
ATOM	822	C	ASN	A	105	43.311	51.507	4.578	1.00	29.73	C
ATOM	823	O	ASN	A	105	42.980	52.594	4.104	1.00	27.61	O
ATOM	824	CB	ASN	A	105	44.881	52.358	6.322	1.00	29.50	C
ATOM	825	CG	ASN	A	105	43.922	52.162	7.471	1.00	29.54	C
ATOM	826	OD1	ASN	A	105	42.709	52.337	7.333	1.00	29.60	O
ATOM	827	ND2	ASN	A	105	44.462	51.787	8.623	1.00	30.86	N
ATOM	828	N	PRO	A	106	42.492	50.441	4.561	1.00	30.30	N
ATOM	829	CA	PRO	A	106	41.145	50.489	3.976	1.00	29.91	C
ATOM	830	C	PRO	A	106	40.187	51.526	4.572	1.00	28.85	C
ATOM	831	O	PRO	A	106	39.417	52.153	3.836	1.00	27.47	O
ATOM	832	CB	PRO	A	106	40.645	49.048	4.141	1.00	30.22	C
ATOM	833	CG	PRO	A	106	41.396	48.552	5.337	1.00	31.55	C
ATOM	834	CD	PRO	A	106	42.779	49.105	5.113	1.00	30.45	C
ATOM	835	N	GLN	A	107	40.231	51.733	5.887	1.00	27.59	N
ATOM	836	CA	GLN	A	107	39.338	52.717	6.502	1.00	27.35	C
ATOM	837	C	GLN	A	107	39.690	54.141	6.094	1.00	25.22	C
ATOM	838	O	GLN	A	107	38.802	54.956	5.886	1.00	24.17	O
ATOM	839	CB	GLN	A	107	39.350	52.606	8.032	1.00	30.78	C
ATOM	840	CG	GLN	A	107	38.761	51.310	8.577	1.00	34.41	C
ATOM	841	CD	GLN	A	107	39.628	50.109	8.273	1.00	36.89	C
ATOM	842	OE1	GLN	A	107	40.815	50.089	8.597	1.00	37.92	O
ATOM	843	NE2	GLN	A	107	39.038	49.094	7.647	1.00	38.50	N
ATOM	844	N	LEU	A	108	40.985	54.443	5.982	1.00	24.27	N
ATOM	845	CA	LEU	A	108	41.412	55.773	5.569	1.00	22.33	C
ATOM	846	C	LEU	A	108	41.073	55.980	4.098	1.00	24.14	C
ATOM	847	O	LEU	A	108	40.646	57.062	3.708	1.00	24.07	O
ATOM	848	CB	LEU	A	108	42.915	55.971	5.781	1.00	22.05	C
ATOM	849	CG	LEU	A	108	43.412	55.906	7.222	1.00	20.35	C
ATOM	850	CD1	LEU	A	108	44.925	56.159	7.233	1.00	18.51	C
ATOM	851	CD2	LEU	A	108	42.682	56.948	8.058	1.00	20.55	C
ATOM	852	N	LYS	A	109	41.272	54.943	3.287	1.00	25.39	N
ATOM	853	CA	LYS	A	109	40.949	55.025	1.861	1.00	26.44	C
ATOM	854	C	LYS	A	109	39.454	55.291	1.689	1.00	25.33	C
ATOM	855	O	LYS	A	109	39.053	56.119	0.876	1.00	25.39	O
ATOM	856	CB	LYS	A	109	41.341	53.723	1.157	1.00	27.29	C
ATOM	857	CG	LYS	A	109	42.850	53.479	1.172	1.00	30.42	C
ATOM	858	CD	LYS	A	109	43.233	52.069	0.744	1.00	31.78	C
ATOM	859	CE	LYS	A	109	42.935	51.819	-0.719	1.00	34.34	C
ATOM	860	NZ	LYS	A	109	43.332	50.427	-1.105	1.00	34.87	N
ATOM	861	N	GLU	A	110	38.635	54.599	2.471	1.00	25.26	N
ATOM	862	CA	GLU	A	110	37.192	54.781	2.405	1.00	25.84	C
ATOM	863	C	GLU	A	110	36.833	56.204	2.837	1.00	25.82	C
ATOM	864	O	GLU	A	110	36.031	56.884	2.191	1.00	24.07	O
ATOM	865	CB	GLU	A	110	36.517	53.755	3.309	1.00	27.90	C
ATOM	866	CG	GLU	A	110	35.014	53.651	3.150	1.00	33.74	C
ATOM	867	CD	GLU	A	110	34.454	52.488	3.943	1.00	36.55	C
ATOM	868	OE1	GLU	A	110	35.008	51.368	3.819	1.00	39.43	O
ATOM	869	OE2	GLU	A	110	33.469	52.684	4.690	1.00	37.94	O
ATOM	870	N	GLY	A	111	37.444	56.666	3.926	1.00	23.09	N
ATOM	871	CA	GLY	A	111	37.170	58.008	4.398	1.00	23.43	C
ATOM	872	C	GLY	A	111	37.511	59.063	3.359	1.00	24.07	C
ATOM	873	O	GLY	A	111	36.753	60.010	3.136	1.00	23.71	O

Forb. Fig 3D

ATOM	874	N	LEU	A	112	38.668	58.903	2.726	1.00	24.01	N
ATOM	875	CA	LEU	A	112	39.101	59.836	1.707	1.00	23.88	C
ATOM	876	C	LEU	A	112	38.096	59.816	0.557	1.00	24.75	C
ATOM	877	O	LEU	A	112	37.699	60.865	0.053	1.00	24.78	O
ATOM	878	CB	LEU	A	112	40.496	59.456	1.191	1.00	24.30	C
ATOM	879	CG	LEU	A	112	40.964	60.294	0.005	1.00	25.63	C
ATOM	880	CD1	LEU	A	112	40.862	61.764	0.366	1.00	24.96	C
ATOM	881	CD2	LEU	A	112	42.391	59.917	-0.374	1.00	25.89	C
ATOM	882	N	GLN	A	113	37.688	58.615	0.158	1.00	25.83	N
ATOM	883	CA	GLN	A	113	36.728	58.461	-0.940	1.00	28.00	C
ATOM	884	C	GLN	A	113	35.426	59.180	-0.602	1.00	28.56	C
ATOM	885	O	GLN	A	113	34.835	59.858	-1.453	1.00	27.86	O
ATOM	886	CB	GLN	A	113	36.451	56.975	-1.204	1.00	29.53	C
ATOM	887	CG	GLN	A	113	35.485	56.724	-2.367	1.00	34.46	C
ATOM	888	CD	GLN	A	113	35.330	55.247	-2.686	1.00	36.49	C
ATOM	889	OE1	GLN	A	113	36.312	54.556	-2.975	1.00	40.20	O
ATOM	890	NE2	GLN	A	113	34.095	54.756	-2.644	1.00	39.57	N
ATOM	891	N	ASN	A	114	34.979	59.039	0.644	1.00	28.19	N
ATOM	892	CA	ASN	A	114	33.743	59.696	1.063	1.00	28.99	C
ATOM	893	C	ASN	A	114	33.879	61.214	1.000	1.00	29.17	C
ATOM	894	O	ASN	A	114	32.987	61.900	0.511	1.00	29.48	O
ATOM	895	CB	ASN	A	114	33.350	59.279	2.489	1.00	30.33	C
ATOM	896	CG	ASN	A	114	33.028	57.807	2.596	1.00	33.08	C
ATOM	897	OD1	ASN	A	114	32.580	57.193	1.630	1.00	33.32	O
ATOM	898	ND2	ASN	A	114	33.238	57.229	3.781	1.00	34.45	N
ATOM	899	N	MET	A	115	34.999	61.744	1.486	1.00	28.25	N
ATOM	900	CA	MET	A	115	35.188	63.180	1.482	1.00	29.28	C
ATOM	901	C	MET	A	115	35.345	63.729	0.071	1.00	31.31	C
ATOM	902	O	MET	A	115	34.967	64.870	-0.202	1.00	31.10	O
ATOM	903	CB	MET	A	115	36.400	63.569	2.335	1.00	28.10	C
ATOM	904	CG	MET	A	115	36.227	63.309	3.831	1.00	25.76	C
ATOM	905	SD	MET	A	115	34.814	64.156	4.566	1.00	25.25	S
ATOM	906	CE	MET	A	115	33.640	62.801	4.589	1.00	25.11	C
ATOM	907	N	GLU	A	116	35.900	62.921	-0.823	1.00	34.08	N
ATOM	908	CA	GLU	A	116	36.079	63.353	-2.206	1.00	36.98	C
ATOM	909	C	GLU	A	116	34.766	63.271	-2.984	1.00	38.24	C
ATOM	910	O	GLU	A	116	34.646	63.831	-4.077	1.00	39.05	O
ATOM	911	CB	GLU	A	116	37.146	62.500	-2.897	1.00	38.22	C
ATOM	912	CG	GLU	A	116	38.568	62.879	-2.503	1.00	40.66	C
ATOM	913	CD	GLU	A	116	39.617	61.981	-3.137	1.00	42.50	C
ATOM	914	OE1	GLU	A	116	40.809	62.351	-3.114	1.00	43.92	O
ATOM	915	OE2	GLU	A	116	39.252	60.900	-3.646	1.00	44.22	O
ATOM	916	N	ALA	A	117	33.780	62.583	-2.419	1.00	39.27	N
ATOM	917	CA	ALA	A	117	32.491	62.434	-3.087	1.00	40.40	C
ATOM	918	C	ALA	A	117	31.422	63.400	-2.580	1.00	41.71	C
ATOM	919	O	ALA	A	117	30.343	63.486	-3.166	1.00	41.50	O
ATOM	920	CB	ALA	A	117	31.998	60.998	-2.943	1.00	39.87	C
ATOM	921	N	ARG	A	118	31.707	64.128	-1.503	1.00	42.14	N
ATOM	922	CA	ARG	A	118	30.713	65.051	-0.960	1.00	42.62	C
ATOM	923	C	ARG	A	118	30.401	66.193	-1.927	1.00	41.64	C
ATOM	924	O	ARG	A	118	29.213	66.563	-2.021	1.00	42.91	O
ATOM	925	CB	ARG	A	118	31.170	65.620	0.392	1.00	45.04	C
ATOM	926	CG	ARG	A	118	32.291	66.640	0.306	1.00	47.51	C
ATOM	927	CD	ARG	A	118	32.613	67.262	1.665	1.00	49.17	C
ATOM	928	NE	ARG	A	118	31.499	68.034	2.212	1.00	51.04	N
ATOM	929	CZ	ARG	A	118	30.511	67.526	2.947	1.00	51.68	C
ATOM	930	NH1	ARG	A	118	30.486	66.232	3.240	1.00	52.22	N
ATOM	931	NH2	ARG	A	118	29.541	68.316	3.388	1.00	52.19	N
ATOM	932	OXT	ARG	A	118	31.349	66.716	-2.550	1.00	39.11	O

Forb. Fig. 3D

TER	933	ARG	A	118							
ATOM	934	N	MET	B	1	64.474	90.985	25.489	1.00	45.58	N
ATOM	935	CA	MET	B	1	65.895	91.007	25.027	1.00	44.89	C
ATOM	936	C	MET	B	1	66.493	89.609	25.132	1.00	44.08	C
ATOM	937	O	MET	B	1	66.351	88.784	24.221	1.00	44.28	O
ATOM	938	CB	MET	B	1	66.703	91.988	25.878	1.00	45.77	C
ATOM	939	N	GLU	B	2	67.168	89.349	26.247	1.00	42.56	N
ATOM	940	CA	GLU	B	2	67.766	88.046	26.475	1.00	41.36	C
ATOM	941	C	GLU	B	2	66.617	87.060	26.657	1.00	40.28	C
ATOM	942	O	GLU	B	2	66.717	85.897	26.276	1.00	39.65	O
ATOM	943	CB	GLU	B	2	68.642	88.072	27.723	1.00	41.18	C
ATOM	944	N	GLN	B	3	65.518	87.550	27.225	1.00	38.84	N
ATOM	945	CA	GLN	B	3	64.354	86.718	27.472	1.00	37.19	C
ATOM	946	C	GLN	B	3	63.747	86.224	26.165	1.00	34.89	C
ATOM	947	O	GLN	B	3	63.314	85.077	26.075	1.00	34.66	O
ATOM	948	CB	GLN	B	3	63.319	87.499	28.289	1.00	39.13	C
ATOM	949	CG	GLN	B	3	62.157	86.660	28.785	1.00	42.81	C
ATOM	950	CD	GLN	B	3	61.235	87.415	29.731	1.00	44.78	C
ATOM	951	OE1	GLN	B	3	61.416	88.611	29.984	1.00	46.39	O
ATOM	952	NE2	GLN	B	3	60.235	86.716	30.258	1.00	45.01	N
ATOM	953	N	VAL	B	4	63.717	87.078	25.146	1.00	32.36	N
ATOM	954	CA	VAL	B	4	63.159	86.661	23.864	1.00	30.31	C
ATOM	955	C	VAL	B	4	64.097	85.648	23.207	1.00	30.07	C
ATOM	956	O	VAL	B	4	63.658	84.584	22.761	1.00	28.88	O
ATOM	957	CB	VAL	B	4	62.946	87.860	22.903	1.00	30.70	C
ATOM	958	CG1	VAL	B	4	62.552	87.357	21.511	1.00	29.09	C
ATOM	959	CG2	VAL	B	4	61.853	88.763	23.440	1.00	28.94	C
ATOM	960	N	ASN	B	5	65.387	85.967	23.163	1.00	28.74	N
ATOM	961	CA	ASN	B	5	66.357	85.058	22.554	1.00	29.27	C
ATOM	962	C	ASN	B	5	66.405	83.728	23.294	1.00	27.83	C
ATOM	963	O	ASN	B	5	66.526	82.670	22.669	1.00	27.35	O
ATOM	964	CB	ASN	B	5	67.755	85.676	22.535	1.00	32.76	C
ATOM	965	CG	ASN	B	5	67.838	86.900	21.643	1.00	35.77	C
ATOM	966	OD1	ASN	B	5	67.250	86.928	20.555	1.00	38.43	O
ATOM	967	ND2	ASN	B	5	68.584	87.916	22.088	1.00	38.15	N
ATOM	968	N	GLU	B	6	66.321	83.776	24.622	1.00	26.19	N
ATOM	969	CA	GLU	B	6	66.351	82.544	25.409	1.00	26.12	C
ATOM	970	C	GLU	B	6	65.167	81.660	25.020	1.00	24.39	C
ATOM	971	O	GLU	B	6	65.327	80.462	24.799	1.00	24.31	O
ATOM	972	CB	GLU	B	6	66.306	82.846	26.918	1.00	29.60	C
ATOM	973	CG	GLU	B	6	65.985	81.606	27.773	1.00	34.45	C
ATOM	974	CD	GLU	B	6	66.160	81.816	29.278	1.00	37.74	C
ATOM	975	OE1	GLU	B	6	65.767	82.885	29.802	1.00	40.40	O
ATOM	976	OE2	GLU	B	6	66.676	80.887	29.944	1.00	40.20	O
ATOM	977	N	LEU	B	7	63.982	82.252	24.928	1.00	22.62	N
ATOM	978	CA	LEU	B	7	62.795	81.485	24.558	1.00	21.23	C
ATOM	979	C	LEU	B	7	62.865	80.966	23.125	1.00	21.65	C
ATOM	980	O	LEU	B	7	62.425	79.851	22.832	1.00	21.11	O
ATOM	981	CB	LEU	B	7	61.538	82.334	24.741	1.00	23.80	C
ATOM	982	CG	LEU	B	7	61.052	82.476	26.183	1.00	23.97	C
ATOM	983	CD1	LEU	B	7	59.948	83.531	26.236	1.00	26.53	C
ATOM	984	CD2	LEU	B	7	60.555	81.121	26.707	1.00	23.86	C
ATOM	985	N	LYS	B	8	63.403	81.776	22.216	1.00	20.28	N
ATOM	986	CA	LYS	B	8	63.524	81.332	20.835	1.00	18.83	C
ATOM	987	C	LYS	B	8	64.445	80.111	20.797	1.00	18.04	C
ATOM	988	O	LYS	B	8	64.143	79.110	20.154	1.00	15.97	O
ATOM	989	CB	LYS	B	8	64.128	82.427	19.943	1.00	19.45	C
ATOM	990	CG	LYS	B	8	64.138	82.030	18.469	1.00	21.42	C
ATOM	991	CD	LYS	B	8	65.043	82.923	17.611	1.00	23.45	C

Forb. Fig 3D

ATOM	992	CE	LYS	B	8	66.506	82.698	17.965	1.00	27.94	C
ATOM	993	NZ	LYS	B	8	67.449	82.925	16.825	1.00	28.15	N
ATOM	994	N	GLU	B	9	65.570	80.197	21.497	1.00	19.01	N
ATOM	995	CA	GLU	B	9	66.523	79.103	21.515	1.00	21.18	C
ATOM	996	C	GLU	B	9	65.914	77.856	22.153	1.00	20.09	C
ATOM	997	O	GLU	B	9	66.131	76.732	21.678	1.00	18.86	O
ATOM	998	CB	GLU	B	9	67.785	79.545	22.255	1.00	25.07	C
ATOM	999	CG	GLU	B	9	68.608	80.565	21.460	1.00	30.86	C
ATOM	1000	CD	GLU	B	9	69.812	81.097	22.221	1.00	34.97	C
ATOM	1001	OE1	GLU	B	9	70.646	80.277	22.663	1.00	38.72	O
ATOM	1002	OE2	GLU	B	9	69.928	82.339	22.369	1.00	39.83	O
ATOM	1003	N	LYS	B	10	65.152	78.049	23.225	1.00	19.39	N
ATOM	1004	CA	LYS	B	10	64.501	76.912	23.878	1.00	19.62	C
ATOM	1005	C	LYS	B	10	63.509	76.256	22.913	1.00	19.26	C
ATOM	1006	O	LYS	B	10	63.392	75.025	22.849	1.00	18.67	O
ATOM	1007	CB	LYS	B	10	63.750	77.367	25.122	1.00	21.87	C
ATOM	1008	CG	LYS	B	10	64.630	77.655	26.321	1.00	24.70	C
ATOM	1009	CD	LYS	B	10	63.762	77.811	27.557	1.00	28.66	C
ATOM	1010	CE	LYS	B	10	62.814	76.616	27.698	1.00	31.58	C
ATOM	1011	NZ	LYS	B	10	61.965	76.651	28.930	1.00	37.05	N
ATOM	1012	N	GLY	B	11	62.777	77.089	22.177	1.00	17.87	N
ATOM	1013	CA	GLY	B	11	61.821	76.572	21.215	1.00	15.89	C
ATOM	1014	C	GLY	B	11	62.542	75.810	20.116	1.00	15.28	C
ATOM	1015	O	GLY	B	11	62.105	74.734	19.693	1.00	15.61	O
ATOM	1016	N	ASN	B	12	63.656	76.362	19.647	1.00	14.48	N
ATOM	1017	CA	ASN	B	12	64.430	75.719	18.599	1.00	14.33	C
ATOM	1018	C	ASN	B	12	64.928	74.361	19.106	1.00	15.37	C
ATOM	1019	O	ASN	B	12	64.920	73.374	18.372	1.00	15.14	O
ATOM	1020	CB	ASN	B	12	65.658	76.567	18.213	1.00	14.92	C
ATOM	1021	CG	ASN	B	12	65.316	77.773	17.355	1.00	17.07	C
ATOM	1022	OD1	ASN	B	12	66.216	78.535	16.953	1.00	19.60	O
ATOM	1023	ND2	ASN	B	12	64.048	77.958	17.065	1.00	12.14	N
ATOM	1024	N	LYS	B	13	65.382	74.330	20.354	1.00	17.18	N
ATOM	1025	CA	LYS	B	13	65.889	73.083	20.935	1.00	18.86	C
ATOM	1026	C	LYS	B	13	64.781	72.036	21.016	1.00	18.44	C
ATOM	1027	O	LYS	B	13	64.984	70.869	20.635	1.00	18.57	O
ATOM	1028	CB	LYS	B	13	66.466	73.367	22.325	1.00	21.51	C
ATOM	1029	CG	LYS	B	13	67.073	72.148	23.034	1.00	27.10	C
ATOM	1030	CD	LYS	B	13	67.698	72.563	24.379	1.00	33.07	C
ATOM	1031	CE	LYS	B	13	67.882	71.358	25.322	1.00	34.82	C
ATOM	1032	NZ	LYS	B	13	68.413	71.726	26.675	1.00	39.00	N
ATOM	1033	N	ALA	B	14	63.611	72.446	21.504	1.00	17.21	N
ATOM	1034	CA	ALA	B	14	62.468	71.530	21.624	1.00	16.78	C
ATOM	1035	C	ALA	B	14	62.108	71.000	20.244	1.00	17.23	C
ATOM	1036	O	ALA	B	14	61.831	69.803	20.063	1.00	16.28	O
ATOM	1037	CB	ALA	B	14	61.262	72.258	22.232	1.00	17.00	C
ATOM	1038	N	LEU	B	15	62.105	71.881	19.251	1.00	15.98	N
ATOM	1039	CA	LEU	B	15	61.772	71.428	17.918	1.00	17.05	C
ATOM	1040	C	LEU	B	15	62.834	70.441	17.422	1.00	17.02	C
ATOM	1041	O	LEU	B	15	62.504	69.462	16.753	1.00	19.10	O
ATOM	1042	CB	LEU	B	15	61.660	72.623	16.962	1.00	17.70	C
ATOM	1043	CG	LEU	B	15	60.891	72.341	15.678	1.00	19.63	C
ATOM	1044	CD1	LEU	B	15	59.422	72.042	15.975	1.00	19.59	C
ATOM	1045	CD2	LEU	B	15	60.968	73.571	14.798	1.00	19.41	C
ATOM	1046	N	SER	B	16	64.095	70.684	17.783	1.00	16.72	N
ATOM	1047	CA	SER	B	16	65.201	69.826	17.349	1.00	17.97	C
ATOM	1048	C	SER	B	16	65.073	68.403	17.861	1.00	18.87	C
ATOM	1049	O	SER	B	16	65.625	67.475	17.247	1.00	20.88	O
ATOM	1050	CB	SER	B	16	66.568	70.400	17.766	1.00	19.23	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1051	OG	SER	B	16	66.872	70.194	19.129	1.00	20.51	O
ATOM	1052	N	VAL	B	17	64.363	68.223	18.971	1.00	18.07	N
ATOM	1053	CA	VAL	B	17	64.169	66.871	19.509	1.00	17.25	C
ATOM	1054	C	VAL	B	17	62.742	66.387	19.262	1.00	18.89	C
ATOM	1055	O	VAL	B	17	62.278	65.440	19.875	1.00	20.12	O
ATOM	1056	CB	VAL	B	17	64.537	66.771	21.017	1.00	17.06	C
ATOM	1057	CG1	VAL	B	17	66.021	67.004	21.171	1.00	18.53	C
ATOM	1058	CG2	VAL	B	17	63.753	67.771	21.857	1.00	16.89	C
ATOM	1059	N	GLY	B	18	62.044	67.054	18.352	1.00	18.10	N
ATOM	1060	CA	GLY	B	18	60.702	66.624	18.013	1.00	17.81	C
ATOM	1061	C	GLY	B	18	59.597	66.906	19.004	1.00	18.54	C
ATOM	1062	O	GLY	B	18	58.497	66.369	18.866	1.00	19.35	O
ATOM	1063	N	ASN	B	19	59.869	67.744	19.998	1.00	17.88	N
ATOM	1064	CA	ASN	B	19	58.850	68.088	20.972	1.00	17.27	C
ATOM	1065	C	ASN	B	19	58.185	69.370	20.476	1.00	17.23	C
ATOM	1066	O	ASN	B	19	58.460	70.483	20.930	1.00	17.32	O
ATOM	1067	CB	ASN	B	19	59.479	68.234	22.351	1.00	20.42	C
ATOM	1068	CG	ASN	B	19	59.954	66.892	22.893	1.00	18.97	C
ATOM	1069	OD1	ASN	B	19	59.433	65.851	22.493	1.00	21.84	O
ATOM	1070	ND2	ASN	B	19	60.922	66.910	23.797	1.00	19.87	N
ATOM	1071	N	ILE	B	20	57.271	69.166	19.539	1.00	15.66	N
ATOM	1072	CA	ILE	B	20	56.592	70.265	18.877	1.00	15.94	C
ATOM	1073	C	ILE	B	20	55.708	71.108	19.766	1.00	16.82	C
ATOM	1074	O	ILE	B	20	55.710	72.335	19.662	1.00	17.31	O
ATOM	1075	CB	ILE	B	20	55.810	69.729	17.676	1.00	16.18	C
ATOM	1076	CG1	ILE	B	20	56.769	68.920	16.801	1.00	18.59	C
ATOM	1077	CG2	ILE	B	20	55.210	70.892	16.884	1.00	16.88	C
ATOM	1078	CD1	ILE	B	20	56.118	68.165	15.682	1.00	22.05	C
ATOM	1079	N	ASP	B	21	54.944	70.483	20.655	1.00	18.28	N
ATOM	1080	CA	ASP	B	21	54.085	71.275	21.540	1.00	19.05	C
ATOM	1081	C	ASP	B	21	54.934	72.213	22.409	1.00	18.41	C
ATOM	1082	O	ASP	B	21	54.582	73.385	22.631	1.00	18.75	O
ATOM	1083	CB	ASP	B	21	53.290	70.358	22.464	1.00	21.22	C
ATOM	1084	CG	ASP	B	21	52.184	69.621	21.755	1.00	25.79	C
ATOM	1085	OD1	ASP	B	21	51.746	68.592	22.308	1.00	30.10	O
ATOM	1086	OD2	ASP	B	21	51.735	70.071	20.680	1.00	27.47	O
ATOM	1087	N	ASP	B	22	56.049	71.690	22.910	1.00	18.33	N
ATOM	1088	CA	ASP	B	22	56.947	72.484	23.747	1.00	18.27	C
ATOM	1089	C	ASP	B	22	57.490	73.635	22.923	1.00	17.44	C
ATOM	1090	O	ASP	B	22	57.581	74.765	23.403	1.00	18.96	O
ATOM	1091	CB	ASP	B	22	58.116	71.639	24.261	1.00	20.92	C
ATOM	1092	CG	ASP	B	22	57.700	70.673	25.350	1.00	26.61	C
ATOM	1093	OD1	ASP	B	22	56.607	70.861	25.944	1.00	29.07	O
ATOM	1094	OD2	ASP	B	22	58.478	69.732	25.622	1.00	29.93	O
ATOM	1095	N	ALA	B	23	57.847	73.353	21.678	1.00	16.58	N
ATOM	1096	CA	ALA	B	23	58.381	74.402	20.806	1.00	16.52	C
ATOM	1097	C	ALA	B	23	57.335	75.502	20.624	1.00	15.73	C
ATOM	1098	O	ALA	B	23	57.635	76.679	20.771	1.00	14.38	O
ATOM	1099	CB	ALA	B	23	58.781	73.814	19.452	1.00	15.09	C
ATOM	1100	N	LEU	B	24	56.104	75.109	20.316	1.00	15.98	N
ATOM	1101	CA	LEU	B	24	55.029	76.072	20.110	1.00	16.46	C
ATOM	1102	C	LEU	B	24	54.829	76.951	21.349	1.00	16.80	C
ATOM	1103	O	LEU	B	24	54.614	78.164	21.246	1.00	16.62	O
ATOM	1104	CB	LEU	B	24	53.734	75.333	19.749	1.00	16.82	C
ATOM	1105	CG	LEU	B	24	53.707	74.699	18.356	1.00	16.80	C
ATOM	1106	CD1	LEU	B	24	52.479	73.784	18.212	1.00	15.12	C
ATOM	1107	CD2	LEU	B	24	53.691	75.821	17.276	1.00	16.59	C
ATOM	1108	N	GLN	B	25	54.913	76.342	22.523	1.00	16.88	N
ATOM	1109	CA	GLN	B	25	54.746	77.107	23.755	1.00	19.01	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1110	C	GLN	B	25	55.858	78.154	23.894	1.00	17.92	C
ATOM	1111	O	GLN	B	25	55.607	79.329	24.216	1.00	19.59	O
ATOM	1112	CB	GLN	B	25	54.754	76.135	24.933	1.00	22.43	C
ATOM	1113	CG	GLN	B	25	54.558	76.757	26.302	1.00	29.23	C
ATOM	1114	CD	GLN	B	25	54.064	75.721	27.296	1.00	34.11	C
ATOM	1115	OE1	GLN	B	25	53.003	75.128	27.102	1.00	36.96	O
ATOM	1116	NE2	GLN	B	25	54.832	75.486	28.355	1.00	36.01	N
ATOM	1117	N	CYS	B	26	57.095	77.733	23.661	1.00	17.17	N
ATOM	1118	CA	CYS	B	26	58.230	78.641	23.755	1.00	17.48	C
ATOM	1119	C	CYS	B	26	58.101	79.788	22.773	1.00	16.65	C
ATOM	1120	O	CYS	B	26	58.295	80.943	23.134	1.00	16.54	O
ATOM	1121	CB	CYS	B	26	59.535	77.913	23.459	1.00	15.94	C
ATOM	1122	SG	CYS	B	26	60.000	76.724	24.744	1.00	20.15	S
ATOM	1123	N	TYR	B	27	57.787	79.474	21.521	1.00	15.56	N
ATOM	1124	CA	TYR	B	27	57.666	80.545	20.536	1.00	14.76	C
ATOM	1125	C	TYR	B	27	56.518	81.498	20.860	1.00	15.62	C
ATOM	1126	O	TYR	B	27	56.645	82.716	20.687	1.00	16.00	O
ATOM	1127	CB	TYR	B	27	57.466	79.987	19.125	1.00	14.64	C
ATOM	1128	CG	TYR	B	27	58.620	79.158	18.591	1.00	15.03	C
ATOM	1129	CD1	TYR	B	27	59.949	79.507	18.837	1.00	13.81	C
ATOM	1130	CD2	TYR	B	27	58.369	78.029	17.802	1.00	14.17	C
ATOM	1131	CE1	TYR	B	27	61.002	78.744	18.315	1.00	11.84	C
ATOM	1132	CE2	TYR	B	27	59.403	77.273	17.265	1.00	13.69	C
ATOM	1133	CZ	TYR	B	27	60.716	77.623	17.518	1.00	12.22	C
ATOM	1134	OH	TYR	B	27	61.720	76.878	16.936	1.00	12.55	O
ATOM	1135	N	SER	B	28	55.407	80.949	21.334	1.00	16.00	N
ATOM	1136	CA	SER	B	28	54.249	81.767	21.676	1.00	17.08	C
ATOM	1137	C	SER	B	28	54.589	82.699	22.843	1.00	18.62	C
ATOM	1138	O	SER	B	28	54.217	83.864	22.833	1.00	18.63	O
ATOM	1139	CB	SER	B	28	53.053	80.869	22.021	1.00	17.62	C
ATOM	1140	OG	SER	B	28	52.644	80.130	20.877	1.00	18.40	O
ATOM	1141	N	GLU	B	29	55.313	82.200	23.834	1.00	19.03	N
ATOM	1142	CA	GLU	B	29	55.704	83.064	24.954	1.00	21.11	C
ATOM	1143	C	GLU	B	29	56.646	84.173	24.463	1.00	22.18	C
ATOM	1144	O	GLU	B	29	56.584	85.314	24.922	1.00	21.52	O
ATOM	1145	CB	GLU	B	29	56.390	82.247	26.046	1.00	22.92	C
ATOM	1146	CG	GLU	B	29	55.446	81.330	26.815	1.00	27.79	C
ATOM	1147	CD	GLU	B	29	54.335	82.085	27.524	1.00	31.45	C
ATOM	1148	OE1	GLU	B	29	54.630	83.079	28.221	1.00	32.20	O
ATOM	1149	OE2	GLU	B	29	53.162	81.678	27.392	1.00	35.44	O
ATOM	1150	N	ALA	B	30	57.519	83.834	23.521	1.00	20.83	N
ATOM	1151	CA	ALA	B	30	58.442	84.820	22.971	1.00	19.74	C
ATOM	1152	C	ALA	B	30	57.677	85.874	22.173	1.00	19.26	C
ATOM	1153	O	ALA	B	30	57.976	87.064	22.257	1.00	18.30	O
ATOM	1154	CB	ALA	B	30	59.477	84.132	22.079	1.00	18.72	C
ATOM	1155	N	ILE	B	31	56.677	85.439	21.411	1.00	18.94	N
ATOM	1156	CA	ILE	B	31	55.880	86.361	20.596	1.00	19.81	C
ATOM	1157	C	ILE	B	31	55.098	87.324	21.488	1.00	23.13	C
ATOM	1158	O	ILE	B	31	54.870	88.484	21.127	1.00	22.50	O
ATOM	1159	CB	ILE	B	31	54.924	85.560	19.668	1.00	19.93	C
ATOM	1160	CG1	ILE	B	31	55.731	85.000	18.498	1.00	18.96	C
ATOM	1161	CG2	ILE	B	31	53.777	86.420	19.178	1.00	21.00	C
ATOM	1162	CD1	ILE	B	31	55.018	83.958	17.723	1.00	18.81	C
ATOM	1163	N	LYS	B	32	54.687	86.851	22.657	1.00	23.83	N
ATOM	1164	CA	LYS	B	32	53.956	87.736	23.549	1.00	26.27	C
ATOM	1165	C	LYS	B	32	54.898	88.839	24.023	1.00	25.38	C
ATOM	1166	O	LYS	B	32	54.487	89.991	24.165	1.00	26.41	O
ATOM	1167	CB	LYS	B	32	53.373	86.952	24.728	1.00	27.94	C
ATOM	1168	CG	LYS	B	32	52.196	86.069	24.332	1.00	32.12	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1169	CD	LYS	B	32	51.159	86.845	23.506	1.00	35.04	C
ATOM	1170	CE	LYS	B	32	49.914	86.001	23.235	1.00	37.72	C
ATOM	1171	NZ	LYS	B	32	48.837	86.769	22.547	1.00	38.46	N
ATOM	1172	N	LEU	B	33	56.165	88.504	24.254	1.00	24.95	N
ATOM	1173	CA	LEU	B	33	57.136	89.503	24.690	1.00	25.30	C
ATOM	1174	C	LEU	B	33	57.589	90.430	23.551	1.00	26.16	C
ATOM	1175	O	LEU	B	33	57.881	91.607	23.776	1.00	24.97	O
ATOM	1176	CB	LEU	B	33	58.377	88.828	25.269	1.00	26.39	C
ATOM	1177	CG	LEU	B	33	58.241	87.987	26.539	1.00	26.64	C
ATOM	1178	CD1	LEU	B	33	59.573	87.310	26.835	1.00	29.29	C
ATOM	1179	CD2	LEU	B	33	57.837	88.885	27.707	1.00	28.28	C
ATOM	1180	N	ASP	B	34	57.642	89.904	22.330	1.00	24.44	N
ATOM	1181	CA	ASP	B	34	58.109	90.680	21.182	1.00	24.65	C
ATOM	1182	C	ASP	B	34	57.230	90.350	19.990	1.00	24.38	C
ATOM	1183	O	ASP	B	34	57.632	89.600	19.094	1.00	23.79	O
ATOM	1184	CB	ASP	B	34	59.562	90.291	20.905	1.00	27.70	C
ATOM	1185	CG	ASP	B	34	60.217	91.146	19.854	1.00	29.07	C
ATOM	1186	OD1	ASP	B	34	59.619	92.154	19.410	1.00	30.77	O
ATOM	1187	OD2	ASP	B	34	61.352	90.791	19.478	1.00	33.28	O
ATOM	1188	N	PRO	B	35	56.020	90.918	19.951	1.00	23.75	N
ATOM	1189	CA	PRO	B	35	55.078	90.667	18.860	1.00	22.92	C
ATOM	1190	C	PRO	B	35	55.466	91.161	17.470	1.00	21.83	C
ATOM	1191	O	PRO	B	35	54.724	90.929	16.520	1.00	22.54	O
ATOM	1192	CB	PRO	B	35	53.794	91.307	19.372	1.00	24.87	C
ATOM	1193	CG	PRO	B	35	54.306	92.457	20.168	1.00	23.94	C
ATOM	1194	CD	PRO	B	35	55.462	91.886	20.919	1.00	24.33	C
ATOM	1195	N	HIS	B	36	56.605	91.841	17.345	1.00	22.20	N
ATOM	1196	CA	HIS	B	36	57.040	92.311	16.028	1.00	23.38	C
ATOM	1197	C	HIS	B	36	58.257	91.570	15.510	1.00	21.84	C
ATOM	1198	O	HIS	B	36	58.870	91.988	14.532	1.00	22.24	O
ATOM	1199	CB	HIS	B	36	57.359	93.804	16.064	1.00	27.01	C
ATOM	1200	CG	HIS	B	36	56.147	94.667	15.968	1.00	30.07	C
ATOM	1201	ND1	HIS	B	36	55.675	95.149	14.766	1.00	32.27	N
ATOM	1202	CD2	HIS	B	36	55.278	95.093	16.914	1.00	32.73	C
ATOM	1203	CE1	HIS	B	36	54.566	95.834	14.975	1.00	33.12	C
ATOM	1204	NE2	HIS	B	36	54.303	95.816	16.268	1.00	34.39	N
ATOM	1205	N	ASN	B	37	58.596	90.457	16.147	1.00	19.39	N
ATOM	1206	CA	ASN	B	37	59.765	89.694	15.744	1.00	18.55	C
ATOM	1207	C	ASN	B	37	59.361	88.645	14.716	1.00	17.34	C
ATOM	1208	O	ASN	B	37	58.831	87.593	15.070	1.00	18.11	O
ATOM	1209	CB	ASN	B	37	60.393	89.029	16.971	1.00	17.37	C
ATOM	1210	CG	ASN	B	37	61.744	88.433	16.678	1.00	19.17	C
ATOM	1211	OD1	ASN	B	37	62.011	87.982	15.557	1.00	18.53	O
ATOM	1212	ND2	ASN	B	37	62.610	88.414	17.682	1.00	20.09	N
ATOM	1213	N	HIS	B	38	59.626	88.942	13.448	1.00	16.16	N
ATOM	1214	CA	HIS	B	38	59.270	88.058	12.349	1.00	14.80	C
ATOM	1215	C	HIS	B	38	59.906	86.684	12.455	1.00	13.78	C
ATOM	1216	O	HIS	B	38	59.357	85.721	11.940	1.00	14.21	O
ATOM	1217	CB	HIS	B	38	59.689	88.681	11.025	1.00	16.69	C
ATOM	1218	CG	HIS	B	38	61.124	89.093	10.996	1.00	15.73	C
ATOM	1219	ND1	HIS	B	38	61.595	90.176	11.706	1.00	15.31	N
ATOM	1220	CD2	HIS	B	38	62.204	88.538	10.390	1.00	17.44	C
ATOM	1221	CE1	HIS	B	38	62.906	90.270	11.539	1.00	17.19	C
ATOM	1222	NE2	HIS	B	38	63.298	89.289	10.745	1.00	17.18	N
ATOM	1223	N	VAL	B	39	61.076	86.595	13.081	1.00	13.10	N
ATOM	1224	CA	VAL	B	39	61.725	85.287	13.197	1.00	14.17	C
ATOM	1225	C	VAL	B	39	60.904	84.356	14.071	1.00	14.62	C
ATOM	1226	O	VAL	B	39	60.826	83.149	13.802	1.00	12.64	O
ATOM	1227	CB	VAL	B	39	63.148	85.420	13.749	1.00	14.55	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1228	CG1	VAL	B	39	63.728	84.057	14.040	1.00	14.74	C
ATOM	1229	CG2	VAL	B	39	64.011	86.193	12.732	1.00	16.62	C
ATOM	1230	N	LEU	B	40	60.258	84.906	15.096	1.00	13.80	N
ATOM	1231	CA	LEU	B	40	59.454	84.065	15.983	1.00	14.66	C
ATOM	1232	C	LEU	B	40	58.234	83.528	15.257	1.00	14.07	C
ATOM	1233	O	LEU	B	40	57.884	82.364	15.419	1.00	14.71	O
ATOM	1234	CB	LEU	B	40	59.004	84.848	17.213	1.00	13.79	C
ATOM	1235	CG	LEU	B	40	60.153	85.471	17.998	1.00	15.00	C
ATOM	1236	CD1	LEU	B	40	59.556	86.298	19.142	1.00	17.27	C
ATOM	1237	CD2	LEU	B	40	61.082	84.398	18.535	1.00	18.15	C
ATOM	1238	N	TYR	B	41	57.590	84.357	14.438	1.00	13.91	N
ATOM	1239	CA	TYR	B	41	56.437	83.885	13.697	1.00	13.25	C
ATOM	1240	C	TYR	B	41	56.834	82.880	12.641	1.00	13.25	C
ATOM	1241	O	TYR	B	41	56.093	81.958	12.375	1.00	13.01	O
ATOM	1242	CB	TYR	B	41	55.707	85.039	13.015	1.00	15.44	C
ATOM	1243	CG	TYR	B	41	55.042	85.947	13.993	1.00	15.79	C
ATOM	1244	CD1	TYR	B	41	53.802	85.622	14.540	1.00	16.77	C
ATOM	1245	CD2	TYR	B	41	55.639	87.145	14.355	1.00	18.25	C
ATOM	1246	CE1	TYR	B	41	53.170	86.495	15.424	1.00	19.36	C
ATOM	1247	CE2	TYR	B	41	55.033	88.003	15.231	1.00	19.68	C
ATOM	1248	CZ	TYR	B	41	53.803	87.678	15.756	1.00	19.07	C
ATOM	1249	OH	TYR	B	41	53.241	88.568	16.626	1.00	22.25	O
ATOM	1250	N	SER	B	42	58.006	83.069	12.038	1.00	13.23	N
ATOM	1251	CA	SER	B	42	58.475	82.148	11.013	1.00	12.16	C
ATOM	1252	C	SER	B	42	58.743	80.804	11.681	1.00	11.74	C
ATOM	1253	O	SER	B	42	58.345	79.761	11.168	1.00	12.97	O
ATOM	1254	CB	SER	B	42	59.771	82.669	10.382	1.00	13.14	C
ATOM	1255	OG	SER	B	42	60.288	81.747	9.435	1.00	12.04	O
ATOM	1256	N	ASN	B	43	59.430	80.825	12.813	1.00	11.40	N
ATOM	1257	CA	ASN	B	43	59.727	79.577	13.517	1.00	11.55	C
ATOM	1258	C	ASN	B	43	58.450	78.906	13.971	1.00	12.02	C
ATOM	1259	O	ASN	B	43	58.310	77.678	13.847	1.00	12.31	O
ATOM	1260	CB	ASN	B	43	60.623	79.834	14.742	1.00	11.38	C
ATOM	1261	CG	ASN	B	43	62.071	80.116	14.367	1.00	12.57	C
ATOM	1262	OD1	ASN	B	43	62.426	80.164	13.191	1.00	13.06	O
ATOM	1263	ND2	ASN	B	43	62.922	80.284	15.378	1.00	13.21	N
ATOM	1264	N	ARG	B	44	57.519	79.696	14.499	1.00	13.02	N
ATOM	1265	CA	ARG	B	44	56.276	79.094	14.961	1.00	12.86	C
ATOM	1266	C	ARG	B	44	55.481	78.511	13.797	1.00	12.29	C
ATOM	1267	O	ARG	B	44	54.829	77.489	13.967	1.00	14.53	O
ATOM	1268	CB	ARG	B	44	55.410	80.073	15.762	1.00	12.45	C
ATOM	1269	CG	ARG	B	44	54.400	79.309	16.619	1.00	13.94	C
ATOM	1270	CD	ARG	B	44	53.622	80.225	17.554	1.00	14.48	C
ATOM	1271	NE	ARG	B	44	52.871	81.255	16.837	1.00	15.19	N
ATOM	1272	CZ	ARG	B	44	52.139	82.186	17.438	1.00	15.96	C
ATOM	1273	NH1	ARG	B	44	52.055	82.212	18.770	1.00	16.54	N
ATOM	1274	NH2	ARG	B	44	51.519	83.116	16.710	1.00	17.61	N
ATOM	1275	N	SER	B	45	55.551	79.144	12.621	1.00	12.04	N
ATOM	1276	CA	SER	B	45	54.865	78.637	11.441	1.00	13.09	C
ATOM	1277	C	SER	B	45	55.432	77.245	11.136	1.00	12.76	C
ATOM	1278	O	SER	B	45	54.686	76.307	10.851	1.00	13.59	O
ATOM	1279	CB	SER	B	45	55.084	79.564	10.239	1.00	12.73	C
ATOM	1280	OG	SER	B	45	54.467	79.026	9.078	1.00	14.14	O
ATOM	1281	N	ALA	B	46	56.762	77.124	11.188	1.00	11.97	N
ATOM	1282	CA	ALA	B	46	57.403	75.824	10.970	1.00	12.20	C
ATOM	1283	C	ALA	B	46	56.894	74.795	11.986	1.00	13.40	C
ATOM	1284	O	ALA	B	46	56.610	73.657	11.623	1.00	14.42	O
ATOM	1285	CB	ALA	B	46	58.948	75.957	11.108	1.00	13.32	C
ATOM	1286	N	ALA	B	47	56.801	75.184	13.258	1.00	12.81	N

Forb. Fig 3D

ATOM	1287	CA	ALA	B	47	56.343	74.256	14.297	1.00	13.90	C
ATOM	1288	C	ALA	B	47	54.897	73.837	14.059	1.00	15.06	C
ATOM	1289	O	ALA	B	47	54.565	72.657	14.195	1.00	15.48	O
ATOM	1290	CB	ALA	B	47	56.500	74.880	15.680	1.00	14.71	C
ATOM	1291	N	TYR	B	48	54.038	74.784	13.693	1.00	15.55	N
ATOM	1292	CA	TYR	B	48	52.636	74.443	13.424	1.00	16.26	C
ATOM	1293	C	TYR	B	48	52.531	73.504	12.226	1.00	15.81	C
ATOM	1294	O	TYR	B	48	51.672	72.617	12.178	1.00	17.91	O
ATOM	1295	CB	TYR	B	48	51.805	75.706	13.146	1.00	16.13	C
ATOM	1296	CG	TYR	B	48	51.293	76.378	14.395	1.00	16.25	C
ATOM	1297	CD1	TYR	B	48	50.589	75.646	15.346	1.00	18.10	C
ATOM	1298	CD2	TYR	B	48	51.486	77.738	14.620	1.00	17.18	C
ATOM	1299	CE1	TYR	B	48	50.094	76.237	16.476	1.00	17.48	C
ATOM	1300	CE2	TYR	B	48	50.987	78.348	15.769	1.00	19.41	C
ATOM	1301	CZ	TYR	B	48	50.291	77.580	16.690	1.00	19.58	C
ATOM	1302	OH	TYR	B	48	49.794	78.128	17.837	1.00	24.06	O
ATOM	1303	N	ALA	B	49	53.395	73.701	11.243	1.00	15.47	N
ATOM	1304	CA	ALA	B	49	53.379	72.863	10.062	1.00	16.31	C
ATOM	1305	C	ALA	B	49	53.775	71.452	10.487	1.00	17.34	C
ATOM	1306	O	ALA	B	49	53.188	70.472	10.034	1.00	18.49	O
ATOM	1307	CB	ALA	B	49	54.367	73.396	9.027	1.00	17.17	C
ATOM	1308	N	LYS	B	50	54.770	71.353	11.363	1.00	17.10	N
ATOM	1309	CA	LYS	B	50	55.221	70.041	11.824	1.00	18.54	C
ATOM	1310	C	LYS	B	50	54.153	69.373	12.686	1.00	18.90	C
ATOM	1311	O	LYS	B	50	54.084	68.142	12.747	1.00	19.80	O
ATOM	1312	CB	LYS	B	50	56.513	70.183	12.627	1.00	20.42	C
ATOM	1313	CG	LYS	B	50	57.733	70.432	11.759	1.00	22.75	C
ATOM	1314	CD	LYS	B	50	58.988	70.582	12.599	1.00	28.86	C
ATOM	1315	CE	LYS	B	50	60.242	70.509	11.738	1.00	31.62	C
ATOM	1316	NZ	LYS	B	50	61.503	70.723	12.508	1.00	34.86	N
ATOM	1317	N	LYS	B	51	53.330	70.198	13.328	1.00	19.82	N
ATOM	1318	CA	LYS	B	51	52.232	69.768	14.214	1.00	21.27	C
ATOM	1319	C	LYS	B	51	51.043	69.326	13.376	1.00	21.39	C
ATOM	1320	O	LYS	B	51	50.191	68.548	13.829	1.00	23.31	O
ATOM	1321	CB	LYS	B	51	51.798	70.953	15.104	1.00	23.56	C
ATOM	1322	CG	LYS	B	51	50.673	70.666	16.090	1.00	28.27	C
ATOM	1323	CD	LYS	B	51	51.093	69.610	17.100	1.00	29.88	C
ATOM	1324	CE	LYS	B	51	50.014	69.370	18.140	1.00	31.62	C
ATOM	1325	NZ	LYS	B	51	50.462	68.347	19.125	1.00	29.48	N
ATOM	1326	N	GLY	B	52	50.979	69.845	12.156	1.00	20.86	N
ATOM	1327	CA	GLY	B	52	49.871	69.530	11.276	1.00	20.49	C
ATOM	1328	C	GLY	B	52	48.747	70.552	11.375	1.00	21.16	C
ATOM	1329	O	GLY	B	52	47.657	70.310	10.855	1.00	21.34	O
ATOM	1330	N	ASP	B	53	48.986	71.671	12.059	1.00	18.90	N
ATOM	1331	CA	ASP	B	53	47.983	72.723	12.176	1.00	20.10	C
ATOM	1332	C	ASP	B	53	48.339	73.697	11.067	1.00	19.81	C
ATOM	1333	O	ASP	B	53	48.981	74.717	11.301	1.00	19.05	O
ATOM	1334	CB	ASP	B	53	48.071	73.429	13.515	1.00	21.61	C
ATOM	1335	CG	ASP	B	53	46.870	74.323	13.775	1.00	22.85	C
ATOM	1336	OD1	ASP	B	53	46.321	74.886	12.800	1.00	23.02	O
ATOM	1337	OD2	ASP	B	53	46.491	74.476	14.955	1.00	25.13	O
ATOM	1338	N	TYR	B	54	47.939	73.344	9.853	1.00	18.95	N
ATOM	1339	CA	TYR	B	54	48.266	74.142	8.686	1.00	17.70	C
ATOM	1340	C	TYR	B	54	47.637	75.518	8.680	1.00	18.12	C
ATOM	1341	O	TYR	B	54	48.219	76.456	8.163	1.00	17.06	O
ATOM	1342	CB	TYR	B	54	47.910	73.362	7.434	1.00	18.75	C
ATOM	1343	CG	TYR	B	54	48.575	72.007	7.411	1.00	17.13	C
ATOM	1344	CD1	TYR	B	54	49.943	71.881	7.661	1.00	16.15	C
ATOM	1345	CD2	TYR	B	54	47.842	70.849	7.145	1.00	19.08	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1346	CE1	TYR	B	54	50.568	70.633	7.651	1.00	19.04	C
ATOM	1347	CE2	TYR	B	54	48.457	69.595	7.133	1.00	18.62	C
ATOM	1348	CZ	TYR	B	54	49.816	69.495	7.389	1.00	17.87	C
ATOM	1349	OH	TYR	B	54	50.433	68.264	7.422	1.00	20.38	O
ATOM	1350	N	GLN	B	55	46.454	75.640	9.265	1.00	18.02	N
ATOM	1351	CA	GLN	B	55	45.796	76.939	9.331	1.00	18.96	C
ATOM	1352	C	GLN	B	55	46.655	77.928	10.135	1.00	17.57	C
ATOM	1353	O	GLN	B	55	46.889	79.064	9.711	1.00	17.64	O
ATOM	1354	CB	GLN	B	55	44.431	76.789	10.010	1.00	20.09	C
ATOM	1355	CG	GLN	B	55	43.676	78.078	10.091	1.00	25.62	C
ATOM	1356	CD	GLN	B	55	43.555	78.703	8.742	1.00	27.71	C
ATOM	1357	OE1	GLN	B	55	43.252	78.021	7.750	1.00	32.03	O
ATOM	1358	NE2	GLN	B	55	43.797	80.001	8.672	1.00	32.36	N
ATOM	1359	N	LYS	B	56	47.131	77.493	11.301	1.00	16.70	N
ATOM	1360	CA	LYS	B	56	47.956	78.362	12.125	1.00	16.03	C
ATOM	1361	C	LYS	B	56	49.322	78.555	11.479	1.00	14.61	C
ATOM	1362	O	LYS	B	56	49.901	79.627	11.603	1.00	16.75	O
ATOM	1363	CB	LYS	B	56	48.082	77.814	13.548	1.00	19.32	C
ATOM	1364	CG	LYS	B	56	46.761	77.924	14.309	1.00	21.31	C
ATOM	1365	CD	LYS	B	56	46.923	77.572	15.774	1.00	26.89	C
ATOM	1366	CE	LYS	B	56	45.576	77.629	16.482	1.00	31.42	C
ATOM	1367	NZ	LYS	B	56	45.692	77.165	17.891	1.00	34.06	N
ATOM	1368	N	ALA	B	57	49.823	77.538	10.782	1.00	12.81	N
ATOM	1369	CA	ALA	B	57	51.116	77.692	10.080	1.00	13.28	C
ATOM	1370	C	ALA	B	57	50.955	78.808	9.045	1.00	13.52	C
ATOM	1371	O	ALA	B	57	51.851	79.626	8.862	1.00	14.16	O
ATOM	1372	CB	ALA	B	57	51.510	76.394	9.372	1.00	12.87	C
ATOM	1373	N	TYR	B	58	49.820	78.800	8.342	1.00	13.03	N
ATOM	1374	CA	TYR	B	58	49.525	79.820	7.329	1.00	14.70	C
ATOM	1375	C	TYR	B	58	49.416	81.203	7.963	1.00	14.64	C
ATOM	1376	O	TYR	B	58	49.997	82.180	7.468	1.00	15.01	O
ATOM	1377	CB	TYR	B	58	48.215	79.473	6.622	1.00	15.29	C
ATOM	1378	CG	TYR	B	58	47.720	80.537	5.666	1.00	14.71	C
ATOM	1379	CD1	TYR	B	58	48.442	80.869	4.538	1.00	15.14	C
ATOM	1380	CD2	TYR	B	58	46.510	81.182	5.891	1.00	16.33	C
ATOM	1381	CE1	TYR	B	58	47.965	81.832	3.635	1.00	16.78	C
ATOM	1382	CE2	TYR	B	58	46.024	82.148	4.999	1.00	17.30	C
ATOM	1383	CZ	TYR	B	58	46.757	82.463	3.883	1.00	18.10	C
ATOM	1384	OH	TYR	B	58	46.304	83.426	2.998	1.00	19.05	O
ATOM	1385	N	GLU	B	59	48.658	81.303	9.053	1.00	14.70	N
ATOM	1386	CA	GLU	B	59	48.505	82.594	9.713	1.00	14.88	C
ATOM	1387	C	GLU	B	59	49.854	83.177	10.167	1.00	16.11	C
ATOM	1388	O	GLU	B	59	50.087	84.381	10.030	1.00	14.47	O
ATOM	1389	CB	GLU	B	59	47.540	82.466	10.897	1.00	18.45	C
ATOM	1390	CG	GLU	B	59	46.165	81.969	10.462	1.00	22.16	C
ATOM	1391	CD	GLU	B	59	45.240	81.671	11.624	1.00	26.86	C
ATOM	1392	OE1	GLU	B	59	45.728	81.602	12.763	1.00	29.89	O
ATOM	1393	OE2	GLU	B	59	44.021	81.485	11.397	1.00	31.00	O
ATOM	1394	N	ASP	B	60	50.731	82.333	10.709	1.00	16.21	N
ATOM	1395	CA	ASP	B	60	52.052	82.805	11.143	1.00	15.14	C
ATOM	1396	C	ASP	B	60	52.917	83.171	9.933	1.00	15.14	C
ATOM	1397	O	ASP	B	60	53.728	84.101	10.007	1.00	13.40	O
ATOM	1398	CB	ASP	B	60	52.768	81.759	11.995	1.00	15.33	C
ATOM	1399	CG	ASP	B	60	52.304	81.772	13.437	1.00	16.70	C
ATOM	1400	OD1	ASP	B	60	51.621	82.750	13.847	1.00	17.19	O
ATOM	1401	OD2	ASP	B	60	52.641	80.812	14.174	1.00	17.25	O
ATOM	1402	N	GLY	B	61	52.756	82.429	8.840	1.00	14.40	N
ATOM	1403	CA	GLY	B	61	53.506	82.742	7.639	1.00	14.62	C
ATOM	1404	C	GLY	B	61	53.043	84.096	7.139	1.00	14.49	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1405	O	GLY	B	61	53.851	84.923	6.708	1.00	13.47	O
ATOM	1406	N	CYS	B	62	51.737	84.335	7.208	1.00	13.11	N
ATOM	1407	CA	CYS	B	62	51.200	85.626	6.769	1.00	16.36	C
ATOM	1408	C	CYS	B	62	51.746	86.759	7.614	1.00	15.55	C
ATOM	1409	O	CYS	B	62	52.098	87.818	7.087	1.00	17.43	O
ATOM	1410	CB	CYS	B	62	49.671	85.639	6.834	1.00	15.80	C
ATOM	1411	SG	CYS	B	62	48.874	84.665	5.541	1.00	20.09	S
ATOM	1412	N	LYS	B	63	51.824	86.543	8.923	1.00	15.58	N
ATOM	1413	CA	LYS	B	63	52.328	87.564	9.820	1.00	14.95	C
ATOM	1414	C	LYS	B	63	53.792	87.848	9.512	1.00	14.34	C
ATOM	1415	O	LYS	B	63	54.238	88.993	9.589	1.00	13.88	O
ATOM	1416	CB	LYS	B	63	52.195	87.112	11.274	1.00	16.32	C
ATOM	1417	CG	LYS	B	63	52.646	88.141	12.291	1.00	19.80	C
ATOM	1418	CD	LYS	B	63	51.855	89.455	12.182	1.00	23.16	C
ATOM	1419	CE	LYS	B	63	52.244	90.423	13.299	1.00	26.51	C
ATOM	1420	NZ	LYS	B	63	51.179	91.452	13.505	1.00	29.37	N
ATOM	1421	N	THR	B	64	54.542	86.800	9.181	1.00	13.47	N
ATOM	1422	CA	THR	B	64	55.957	86.989	8.853	1.00	12.93	C
ATOM	1423	C	THR	B	64	56.118	87.901	7.638	1.00	14.50	C
ATOM	1424	O	THR	B	64	56.936	88.834	7.646	1.00	15.21	O
ATOM	1425	CB	THR	B	64	56.646	85.632	8.577	1.00	12.85	C
ATOM	1426	OG1	THR	B	64	56.443	84.778	9.715	1.00	14.62	O
ATOM	1427	CG2	THR	B	64	58.144	85.825	8.383	1.00	12.69	C
ATOM	1428	N	VAL	B	65	55.334	87.624	6.600	1.00	14.69	N
ATOM	1429	CA	VAL	B	65	55.367	88.431	5.386	1.00	14.23	C
ATOM	1430	C	VAL	B	65	54.922	89.862	5.683	1.00	16.57	C
ATOM	1431	O	VAL	B	65	55.493	90.816	5.168	1.00	16.43	O
ATOM	1432	CB	VAL	B	65	54.466	87.810	4.289	1.00	15.72	C
ATOM	1433	CG1	VAL	B	65	54.337	88.764	3.098	1.00	13.61	C
ATOM	1434	CG2	VAL	B	65	55.062	86.497	3.835	1.00	14.34	C
ATOM	1435	N	ASP	B	66	53.908	90.020	6.525	1.00	16.67	N
ATOM	1436	CA	ASP	B	66	53.442	91.363	6.842	1.00	18.60	C
ATOM	1437	C	ASP	B	66	54.514	92.164	7.559	1.00	18.39	C
ATOM	1438	O	ASP	B	66	54.698	93.357	7.305	1.00	17.52	O
ATOM	1439	CB	ASP	B	66	52.186	91.295	7.709	1.00	22.02	C
ATOM	1440	CG	ASP	B	66	51.038	90.637	6.994	1.00	29.29	C
ATOM	1441	OD1	ASP	B	66	50.973	90.755	5.747	1.00	33.26	O
ATOM	1442	OD2	ASP	B	66	50.194	90.013	7.672	1.00	34.17	O
ATOM	1443	N	LEU	B	67	55.236	91.507	8.454	1.00	16.81	N
ATOM	1444	CA	LEU	B	67	56.285	92.199	9.193	1.00	15.33	C
ATOM	1445	C	LEU	B	67	57.513	92.512	8.359	1.00	16.14	C
ATOM	1446	O	LEU	B	67	58.098	93.587	8.484	1.00	18.17	O
ATOM	1447	CB	LEU	B	67	56.724	91.356	10.387	1.00	14.97	C
ATOM	1448	CG	LEU	B	67	55.729	91.311	11.530	1.00	15.57	C
ATOM	1449	CD1	LEU	B	67	56.096	90.172	12.479	1.00	16.23	C
ATOM	1450	CD2	LEU	B	67	55.767	92.668	12.252	1.00	16.14	C
ATOM	1451	N	LYS	B	68	57.896	91.563	7.508	1.00	15.90	N
ATOM	1452	CA	LYS	B	68	59.090	91.678	6.681	1.00	15.69	C
ATOM	1453	C	LYS	B	68	58.775	91.303	5.248	1.00	15.79	C
ATOM	1454	O	LYS	B	68	59.144	90.235	4.763	1.00	14.35	O
ATOM	1455	CB	LYS	B	68	60.177	90.756	7.245	1.00	16.85	C
ATOM	1456	CG	LYS	B	68	60.783	91.259	8.553	1.00	18.46	C
ATOM	1457	CD	LYS	B	68	61.571	92.547	8.363	1.00	19.18	C
ATOM	1458	CE	LYS	B	68	63.067	92.301	8.208	1.00	24.07	C
ATOM	1459	NZ	LYS	B	68	63.820	93.591	8.143	1.00	25.68	N
ATOM	1460	N	PRO	B	69	58.108	92.204	4.531	1.00	14.78	N
ATOM	1461	CA	PRO	B	69	57.758	91.899	3.146	1.00	14.09	C
ATOM	1462	C	PRO	B	69	58.895	91.605	2.192	1.00	13.95	C
ATOM	1463	O	PRO	B	69	58.665	91.031	1.126	1.00	14.73	O

Forb. Fig 3D

ATOM	1464	CB	PRO	B	69	56.903	93.095	2.724	1.00	15.65	C
ATOM	1465	CG	PRO	B	69	57.391	94.185	3.560	1.00	17.05	C
ATOM	1466	CD	PRO	B	69	57.714	93.570	4.907	1.00	16.88	C
ATOM	1467	N	ASP	B	70	60.124	91.977	2.552	1.00	13.64	N
ATOM	1468	CA	ASP	B	70	61.238	91.688	1.658	1.00	14.40	C
ATOM	1469	C	ASP	B	70	61.925	90.357	1.998	1.00	14.48	C
ATOM	1470	O	ASP	B	70	62.763	89.893	1.234	1.00	16.04	O
ATOM	1471	CB	ASP	B	70	62.313	92.789	1.701	1.00	14.32	C
ATOM	1472	CG	ASP	B	70	61.823	94.137	1.176	1.00	16.45	C
ATOM	1473	OD1	ASP	B	70	61.113	94.187	0.143	1.00	14.12	O
ATOM	1474	OD2	ASP	B	70	62.195	95.157	1.802	1.00	17.73	O
ATOM	1475	N	TRP	B	71	61.576	89.751	3.130	1.00	14.52	N
ATOM	1476	CA	TRP	B	71	62.237	88.519	3.560	1.00	13.97	C
ATOM	1477	C	TRP	B	71	61.660	87.274	2.900	1.00	15.75	C
ATOM	1478	O	TRP	B	71	60.510	86.908	3.116	1.00	14.23	O
ATOM	1479	CB	TRP	B	71	62.163	88.419	5.082	1.00	13.99	C
ATOM	1480	CG	TRP	B	71	63.054	87.352	5.664	1.00	14.66	C
ATOM	1481	CD1	TRP	B	71	64.343	87.065	5.297	1.00	17.40	C
ATOM	1482	CD2	TRP	B	71	62.742	86.486	6.750	1.00	16.46	C
ATOM	1483	NE1	TRP	B	71	64.855	86.061	6.101	1.00	16.25	N
ATOM	1484	CE2	TRP	B	71	63.886	85.690	6.999	1.00	16.22	C
ATOM	1485	CE3	TRP	B	71	61.607	86.305	7.549	1.00	16.97	C
ATOM	1486	CZ2	TRP	B	71	63.921	84.726	8.013	1.00	16.20	C
ATOM	1487	CZ3	TRP	B	71	61.643	85.347	8.566	1.00	17.49	C
ATOM	1488	CH2	TRP	B	71	62.795	84.570	8.784	1.00	19.69	C
ATOM	1489	N	GLY	B	72	62.486	86.617	2.091	1.00	16.12	N
ATOM	1490	CA	GLY	B	72	62.013	85.460	1.367	1.00	16.50	C
ATOM	1491	C	GLY	B	72	61.466	84.332	2.204	1.00	15.59	C
ATOM	1492	O	GLY	B	72	60.494	83.707	1.821	1.00	15.72	O
ATOM	1493	N	LYS	B	73	62.059	84.081	3.357	1.00	16.48	N
ATOM	1494	CA	LYS	B	73	61.615	82.958	4.163	1.00	17.14	C
ATOM	1495	C	LYS	B	73	60.162	83.027	4.616	1.00	18.09	C
ATOM	1496	O	LYS	B	73	59.494	81.987	4.755	1.00	16.73	O
ATOM	1497	CB	LYS	B	73	62.549	82.780	5.361	1.00	19.90	C
ATOM	1498	CG	LYS	B	73	62.545	81.378	5.915	1.00	22.70	C
ATOM	1499	CD	LYS	B	73	63.885	81.111	6.573	1.00	23.08	C
ATOM	1500	CE	LYS	B	73	64.031	79.688	6.964	1.00	24.49	C
ATOM	1501	NZ	LYS	B	73	65.263	79.543	7.758	1.00	20.53	N
ATOM	1502	N	GLY	B	74	59.653	84.235	4.847	1.00	16.42	N
ATOM	1503	CA	GLY	B	74	58.262	84.346	5.260	1.00	14.02	C
ATOM	1504	C	GLY	B	74	57.344	83.826	4.161	1.00	13.63	C
ATOM	1505	O	GLY	B	74	56.300	83.230	4.427	1.00	13.27	O
ATOM	1506	N	TYR	B	75	57.732	84.066	2.910	1.00	12.84	N
ATOM	1507	CA	TYR	B	75	56.932	83.601	1.789	1.00	10.97	C
ATOM	1508	C	TYR	B	75	57.025	82.077	1.716	1.00	11.93	C
ATOM	1509	O	TYR	B	75	56.054	81.407	1.385	1.00	13.28	O
ATOM	1510	CB	TYR	B	75	57.426	84.234	0.497	1.00	12.37	C
ATOM	1511	CG	TYR	B	75	57.175	85.731	0.450	1.00	12.44	C
ATOM	1512	CD1	TYR	B	75	55.959	86.234	-0.024	1.00	11.81	C
ATOM	1513	CD2	TYR	B	75	58.131	86.627	0.907	1.00	11.55	C
ATOM	1514	CE1	TYR	B	75	55.709	87.612	-0.043	1.00	10.58	C
ATOM	1515	CE2	TYR	B	75	57.897	87.996	0.892	1.00	12.05	C
ATOM	1516	CZ	TYR	B	75	56.685	88.474	0.412	1.00	11.71	C
ATOM	1517	OH	TYR	B	75	56.473	89.826	0.392	1.00	13.29	O
ATOM	1518	N	SER	B	76	58.191	81.527	2.056	1.00	12.60	N
ATOM	1519	CA	SER	B	76	58.309	80.065	2.053	1.00	13.20	C
ATOM	1520	C	SER	B	76	57.372	79.474	3.106	1.00	14.05	C
ATOM	1521	O	SER	B	76	56.762	78.423	2.866	1.00	15.31	O
ATOM	1522	CB	SER	B	76	59.742	79.611	2.357	1.00	15.89	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1523	OG	SER	B	76	60.622	79.986	1.309	1.00	22.01	O
ATOM	1524	N	ARG	B	77	57.285	80.113	4.273	1.00	13.21	N
ATOM	1525	CA	ARG	B	77	56.389	79.629	5.343	1.00	13.52	C
ATOM	1526	C	ARG	B	77	54.940	79.679	4.887	1.00	15.20	C
ATOM	1527	O	ARG	B	77	54.171	78.734	5.060	1.00	13.97	O
ATOM	1528	CB	ARG	B	77	56.492	80.498	6.600	1.00	13.40	C
ATOM	1529	CG	ARG	B	77	57.840	80.474	7.291	1.00	12.93	C
ATOM	1530	CD	ARG	B	77	58.255	79.056	7.632	1.00	11.81	C
ATOM	1531	NE	ARG	B	77	59.509	79.071	8.369	1.00	11.88	N
ATOM	1532	CZ	ARG	B	77	60.315	78.021	8.508	1.00	13.52	C
ATOM	1533	NH1	ARG	B	77	60.002	76.860	7.951	1.00	14.44	N
ATOM	1534	NH2	ARG	B	77	61.434	78.146	9.214	1.00	12.54	N
ATOM	1535	N	LYS	B	78	54.566	80.824	4.337	1.00	11.89	N
ATOM	1536	CA	LYS	B	78	53.190	81.025	3.909	1.00	13.16	C
ATOM	1537	C	LYS	B	78	52.805	80.063	2.796	1.00	13.02	C
ATOM	1538	O	LYS	B	78	51.737	79.459	2.833	1.00	12.69	O
ATOM	1539	CB	LYS	B	78	53.019	82.484	3.444	1.00	12.73	C
ATOM	1540	CG	LYS	B	78	51.602	82.873	3.008	1.00	13.00	C
ATOM	1541	CD	LYS	B	78	51.556	84.382	2.754	1.00	14.40	C
ATOM	1542	CE	LYS	B	78	50.187	84.854	2.271	1.00	19.90	C
ATOM	1543	NZ	LYS	B	78	50.190	86.357	2.120	1.00	22.21	N
ATOM	1544	N	ALA	B	79	53.677	79.936	1.804	1.00	12.05	N
ATOM	1545	CA	ALA	B	79	53.413	79.082	0.659	1.00	12.85	C
ATOM	1546	C	ALA	B	79	53.414	77.610	1.048	1.00	13.40	C
ATOM	1547	O	ALA	B	79	52.623	76.820	0.533	1.00	14.20	O
ATOM	1548	CB	ALA	B	79	54.470	79.336	-0.419	1.00	13.64	C
ATOM	1549	N	ALA	B	80	54.305	77.227	1.951	1.00	13.84	N
ATOM	1550	CA	ALA	B	80	54.333	75.811	2.345	1.00	14.70	C
ATOM	1551	C	ALA	B	80	53.021	75.465	3.039	1.00	13.87	C
ATOM	1552	O	ALA	B	80	52.455	74.392	2.815	1.00	13.76	O
ATOM	1553	CB	ALA	B	80	55.492	75.539	3.278	1.00	14.27	C
ATOM	1554	N	ALA	B	81	52.529	76.385	3.864	1.00	13.70	N
ATOM	1555	CA	ALA	B	81	51.282	76.143	4.587	1.00	13.39	C
ATOM	1556	C	ALA	B	81	50.160	76.020	3.577	1.00	13.23	C
ATOM	1557	O	ALA	B	81	49.301	75.140	3.681	1.00	14.58	O
ATOM	1558	CB	ALA	B	81	50.992	77.288	5.563	1.00	14.90	C
ATOM	1559	N	LEU	B	82	50.173	76.892	2.572	1.00	12.30	N
ATOM	1560	CA	LEU	B	82	49.150	76.845	1.540	1.00	13.12	C
ATOM	1561	C	LEU	B	82	49.188	75.512	0.804	1.00	14.43	C
ATOM	1562	O	LEU	B	82	48.149	74.946	0.506	1.00	15.74	O
ATOM	1563	CB	LEU	B	82	49.329	78.006	0.549	1.00	12.77	C
ATOM	1564	CG	LEU	B	82	48.862	79.349	1.118	1.00	11.61	C
ATOM	1565	CD1	LEU	B	82	49.413	80.464	0.223	1.00	13.20	C
ATOM	1566	CD2	LEU	B	82	47.316	79.434	1.170	1.00	12.91	C
ATOM	1567	N	GLU	B	83	50.381	75.003	0.526	1.00	15.00	N
ATOM	1568	CA	GLU	B	83	50.467	73.715	-0.150	1.00	17.31	C
ATOM	1569	C	GLU	B	83	49.848	72.631	0.735	1.00	16.67	C
ATOM	1570	O	GLU	B	83	49.123	71.766	0.231	1.00	17.55	O
ATOM	1571	CB	GLU	B	83	51.919	73.355	-0.472	1.00	16.92	C
ATOM	1572	CG	GLU	B	83	52.544	74.217	-1.558	1.00	20.30	C
ATOM	1573	CD	GLU	B	83	53.882	73.677	-2.006	1.00	22.88	C
ATOM	1574	OE1	GLU	B	83	53.945	72.475	-2.350	1.00	25.52	O
ATOM	1575	OE2	GLU	B	83	54.860	74.444	-2.024	1.00	24.10	O
ATOM	1576	N	PHE	B	84	50.120	72.672	2.042	1.00	16.80	N
ATOM	1577	CA	PHE	B	84	49.565	71.661	2.946	1.00	16.68	C
ATOM	1578	C	PHE	B	84	48.044	71.784	2.986	1.00	16.57	C
ATOM	1579	O	PHE	B	84	47.357	70.789	3.229	1.00	19.44	O
ATOM	1580	CB	PHE	B	84	50.106	71.811	4.374	1.00	16.97	C
ATOM	1581	CG	PHE	B	84	51.515	71.317	4.568	1.00	17.04	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1582	CD1	PHE	B	84	52.502	72.173	5.058	1.00	19.27	C
ATOM	1583	CD2	PHE	B	84	51.842	69.981	4.334	1.00	20.42	C
ATOM	1584	CE1	PHE	B	84	53.802	71.703	5.323	1.00	19.55	C
ATOM	1585	CE2	PHE	B	84	53.122	69.499	4.590	1.00	19.60	C
ATOM	1586	CZ	PHE	B	84	54.108	70.352	5.086	1.00	21.91	C
ATOM	1587	N	LEU	B	85	47.530	72.998	2.766	1.00	16.73	N
ATOM	1588	CA	LEU	B	85	46.084	73.245	2.762	1.00	16.61	C
ATOM	1589	C	LEU	B	85	45.468	72.970	1.388	1.00	17.29	C
ATOM	1590	O	LEU	B	85	44.285	73.199	1.172	1.00	17.99	O
ATOM	1591	CB	LEU	B	85	45.790	74.704	3.172	1.00	15.21	C
ATOM	1592	CG	LEU	B	85	46.089	75.075	4.616	1.00	15.67	C
ATOM	1593	CD1	LEU	B	85	46.047	76.567	4.785	1.00	15.37	C
ATOM	1594	CD2	LEU	B	85	45.067	74.415	5.536	1.00	16.07	C
ATOM	1595	N	ASN	B	86	46.283	72.474	0.467	1.00	17.45	N
ATOM	1596	CA	ASN	B	86	45.857	72.163	-0.899	1.00	18.35	C
ATOM	1597	C	ASN	B	86	45.376	73.406	-1.635	1.00	19.59	C
ATOM	1598	O	ASN	B	86	44.476	73.336	-2.477	1.00	19.64	O
ATOM	1599	CB	ASN	B	86	44.756	71.089	-0.905	1.00	21.61	C
ATOM	1600	CG	ASN	B	86	45.257	69.738	-0.415	1.00	24.21	C
ATOM	1601	OD1	ASN	B	86	46.258	69.208	-0.912	1.00	27.05	O
ATOM	1602	ND2	ASN	B	86	44.561	69.171	0.556	1.00	25.54	N
ATOM	1603	N	ARG	B	87	45.966	74.547	-1.294	1.00	16.02	N
ATOM	1604	CA	ARG	B	87	45.638	75.815	-1.950	1.00	16.49	C
ATOM	1605	C	ARG	B	87	46.845	76.107	-2.836	1.00	16.58	C
ATOM	1606	O	ARG	B	87	47.616	77.030	-2.628	1.00	14.54	O
ATOM	1607	CB	ARG	B	87	45.398	76.881	-0.875	1.00	16.46	C
ATOM	1608	CG	ARG	B	87	44.079	76.614	-0.150	1.00	17.45	C
ATOM	1609	CD	ARG	B	87	43.890	77.435	1.098	1.00	17.42	C
ATOM	1610	NE	ARG	B	87	43.896	78.875	0.844	1.00	15.93	N
ATOM	1611	CZ	ARG	B	87	43.748	79.783	1.808	1.00	14.81	C
ATOM	1612	NH1	ARG	B	87	43.584	79.397	3.072	1.00	16.08	N
ATOM	1613	NH2	ARG	B	87	43.768	81.077	1.520	1.00	16.09	N
ATOM	1614	N	PHE	B	88	47.000	75.275	-3.858	1.00	16.95	N
ATOM	1615	CA	PHE	B	88	48.152	75.347	-4.730	1.00	16.02	C
ATOM	1616	C	PHE	B	88	48.332	76.615	-5.554	1.00	16.52	C
ATOM	1617	O	PHE	B	88	49.456	77.109	-5.686	1.00	16.81	O
ATOM	1618	CB	PHE	B	88	48.180	74.094	-5.619	1.00	19.94	C
ATOM	1619	CG	PHE	B	88	48.139	72.791	-4.831	1.00	22.92	C
ATOM	1620	CD1	PHE	B	88	49.212	72.400	-4.034	1.00	24.94	C
ATOM	1621	CD2	PHE	B	88	47.010	71.974	-4.873	1.00	25.75	C
ATOM	1622	CE1	PHE	B	88	49.170	71.215	-3.288	1.00	25.63	C
ATOM	1623	CE2	PHE	B	88	46.950	70.786	-4.135	1.00	25.44	C
ATOM	1624	CZ	PHE	B	88	48.034	70.405	-3.338	1.00	26.40	C
ATOM	1625	N	GLU	B	89	47.262	77.155	-6.122	1.00	16.75	N
ATOM	1626	CA	GLU	B	89	47.463	78.375	-6.903	1.00	16.69	C
ATOM	1627	C	GLU	B	89	47.877	79.520	-5.993	1.00	15.30	C
ATOM	1628	O	GLU	B	89	48.687	80.369	-6.385	1.00	14.94	O
ATOM	1629	CB	GLU	B	89	46.208	78.749	-7.682	1.00	17.03	C
ATOM	1630	CG	GLU	B	89	45.804	77.674	-8.699	1.00	19.70	C
ATOM	1631	CD	GLU	B	89	46.855	77.447	-9.777	1.00	22.47	C
ATOM	1632	OE1	GLU	B	89	46.845	76.362	-10.410	1.00	27.49	O
ATOM	1633	OE2	GLU	B	89	47.674	78.345	-10.018	1.00	23.43	O
ATOM	1634	N	GLU	B	90	47.324	79.559	-4.785	1.00	14.86	N
ATOM	1635	CA	GLU	B	90	47.722	80.614	-3.859	1.00	13.68	C
ATOM	1636	C	GLU	B	90	49.179	80.400	-3.445	1.00	14.58	C
ATOM	1637	O	GLU	B	90	49.919	81.370	-3.250	1.00	14.33	O
ATOM	1638	CB	GLU	B	90	46.814	80.631	-2.647	1.00	14.15	C
ATOM	1639	CG	GLU	B	90	45.432	81.133	-2.999	1.00	17.01	C
ATOM	1640	CD	GLU	B	90	44.471	80.967	-1.860	1.00	16.73	C

Forb. Fig 3D

ATOM	1641	OE1	GLU	B	90	44.379	81.886	-1.027	1.00	16.05	O
ATOM	1642	OE2	GLU	B	90	43.820	79.900	-1.780	1.00	18.58	O
ATOM	1643	N	ALA	B	91	49.586	79.138	-3.301	1.00	13.39	N
ATOM	1644	CA	ALA	B	91	50.984	78.857	-2.947	1.00	13.59	C
ATOM	1645	C	ALA	B	91	51.874	79.382	-4.053	1.00	13.77	C
ATOM	1646	O	ALA	B	91	52.906	80.002	-3.795	1.00	13.72	O
ATOM	1647	CB	ALA	B	91	51.217	77.348	-2.777	1.00	13.42	C
ATOM	1648	N	LYS	B	92	51.478	79.124	-5.296	1.00	13.79	N
ATOM	1649	CA	LYS	B	92	52.234	79.604	-6.446	1.00	15.69	C
ATOM	1650	C	LYS	B	92	52.355	81.141	-6.409	1.00	14.33	C
ATOM	1651	O	LYS	B	92	53.461	81.716	-6.554	1.00	15.73	O
ATOM	1652	CB	LYS	B	92	51.525	79.179	-7.741	1.00	18.27	C
ATOM	1653	CG	LYS	B	92	52.257	79.584	-9.022	1.00	23.56	C
ATOM	1654	CD	LYS	B	92	51.572	78.968	-10.261	1.00	25.84	C
ATOM	1655	CE	LYS	B	92	52.369	79.211	-11.547	1.00	28.88	C
ATOM	1656	NZ	LYS	B	92	52.400	80.647	-11.969	1.00	30.50	N
ATOM	1657	N	ARG	B	93	51.228	81.807	-6.209	1.00	13.66	N
ATOM	1658	CA	ARG	B	93	51.231	83.277	-6.166	1.00	13.31	C
ATOM	1659	C	ARG	B	93	52.150	83.789	-5.060	1.00	13.47	C
ATOM	1660	O	ARG	B	93	52.805	84.831	-5.213	1.00	14.59	O
ATOM	1661	CB	ARG	B	93	49.823	83.814	-5.901	1.00	14.53	C
ATOM	1662	CG	ARG	B	93	48.871	83.721	-7.083	1.00	16.78	C
ATOM	1663	CD	ARG	B	93	49.298	84.655	-8.228	1.00	18.74	C
ATOM	1664	NE	ARG	B	93	48.213	84.818	-9.199	1.00	20.31	N
ATOM	1665	CZ	ARG	B	93	48.253	85.615	-10.259	1.00	21.67	C
ATOM	1666	NH1	ARG	B	93	49.331	86.341	-10.516	1.00	23.87	N
ATOM	1667	NH2	ARG	B	93	47.200	85.689	-11.070	1.00	21.52	N
ATOM	1668	N	THR	B	94	52.181	83.073	-3.936	1.00	13.57	N
ATOM	1669	CA	THR	B	94	52.985	83.477	-2.798	1.00	12.52	C
ATOM	1670	C	THR	B	94	54.465	83.370	-3.094	1.00	12.79	C
ATOM	1671	O	THR	B	94	55.200	84.275	-2.763	1.00	13.77	O
ATOM	1672	CB	THR	B	94	52.608	82.647	-1.549	1.00	11.58	C
ATOM	1673	OG1	THR	B	94	51.210	82.852	-1.274	1.00	15.77	O
ATOM	1674	CG2	THR	B	94	53.433	83.072	-0.323	1.00	12.05	C
ATOM	1675	N	TYR	B	95	54.899	82.267	-3.706	1.00	14.15	N
ATOM	1676	CA	TYR	B	95	56.313	82.150	-4.073	1.00	13.75	C
ATOM	1677	C	TYR	B	95	56.636	83.275	-5.051	1.00	14.27	C
ATOM	1678	O	TYR	B	95	57.707	83.885	-4.987	1.00	15.34	O
ATOM	1679	CB	TYR	B	95	56.603	80.817	-4.781	1.00	15.90	C
ATOM	1680	CG	TYR	B	95	56.600	79.613	-3.886	1.00	15.50	C
ATOM	1681	CD1	TYR	B	95	55.735	78.549	-4.140	1.00	15.93	C
ATOM	1682	CD2	TYR	B	95	57.461	79.522	-2.784	1.00	15.69	C
ATOM	1683	CE1	TYR	B	95	55.721	77.411	-3.319	1.00	16.56	C
ATOM	1684	CE2	TYR	B	95	57.449	78.395	-1.956	1.00	17.28	C
ATOM	1685	CZ	TYR	B	95	56.576	77.348	-2.231	1.00	16.27	C
ATOM	1686	OH	TYR	B	95	56.545	76.263	-1.383	1.00	20.05	O
ATOM	1687	N	GLU	B	96	55.709	83.543	-5.969	1.00	14.68	N
ATOM	1688	CA	GLU	B	96	55.949	84.575	-6.969	1.00	15.83	C
ATOM	1689	C	GLU	B	96	56.054	85.949	-6.342	1.00	15.13	C
ATOM	1690	O	GLU	B	96	56.862	86.760	-6.786	1.00	16.00	O
ATOM	1691	CB	GLU	B	96	54.866	84.533	-8.055	1.00	17.27	C
ATOM	1692	CG	GLU	B	96	54.936	83.208	-8.826	1.00	19.49	C
ATOM	1693	CD	GLU	B	96	53.889	83.060	-9.898	1.00	24.97	C
ATOM	1694	OE1	GLU	B	96	52.834	83.704	-9.778	1.00	26.35	O
ATOM	1695	OE2	GLU	B	96	54.129	82.271	-10.853	1.00	27.55	O
ATOM	1696	N	GLU	B	97	55.259	86.204	-5.304	1.00	14.98	N
ATOM	1697	CA	GLU	B	97	55.315	87.506	-4.627	1.00	14.75	C
ATOM	1698	C	GLU	B	97	56.654	87.651	-3.930	1.00	14.72	C
ATOM	1699	O	GLU	B	97	57.259	88.705	-3.965	1.00	14.55	O

Forb. Fig. 3 D

ATOM	1700	CB	GLU	B	97	54.208	87.642	-3.589	1.00	15.50	C
ATOM	1701	CG	GLU	B	97	52.880	88.014	-4.179	1.00	17.35	C
ATOM	1702	CD	GLU	B	97	52.964	89.302	-4.969	1.00	20.52	C
ATOM	1703	OE1	GLU	B	97	53.468	90.297	-4.420	1.00	18.22	O
ATOM	1704	OE2	GLU	B	97	52.529	89.298	-6.129	1.00	24.23	O
ATOM	1705	N	GLY	B	98	57.106	86.589	-3.274	1.00	13.64	N
ATOM	1706	CA	GLY	B	98	58.390	86.658	-2.600	1.00	13.71	C
ATOM	1707	C	GLY	B	98	59.501	86.956	-3.592	1.00	15.58	C
ATOM	1708	O	GLY	B	98	60.462	87.676	-3.279	1.00	16.51	O
ATOM	1709	N	LEU	B	99	59.375	86.409	-4.799	1.00	16.19	N
ATOM	1710	CA	LEU	B	99	60.398	86.625	-5.822	1.00	17.13	C
ATOM	1711	C	LEU	B	99	60.350	88.039	-6.381	1.00	16.87	C
ATOM	1712	O	LEU	B	99	61.322	88.514	-6.974	1.00	18.26	O
ATOM	1713	CB	LEU	B	99	60.283	85.553	-6.922	1.00	17.60	C
ATOM	1714	CG	LEU	B	99	60.752	84.192	-6.361	1.00	20.55	C
ATOM	1715	CD1	LEU	B	99	60.306	83.075	-7.292	1.00	21.30	C
ATOM	1716	CD2	LEU	B	99	62.291	84.161	-6.196	1.00	20.02	C
ATOM	1717	N	LYS	B	100	59.228	88.724	-6.206	1.00	16.08	N
ATOM	1718	CA	LYS	B	100	59.166	90.110	-6.653	1.00	17.81	C
ATOM	1719	C	LYS	B	100	60.044	90.944	-5.711	1.00	17.96	C
ATOM	1720	O	LYS	B	100	60.601	91.960	-6.121	1.00	19.27	O
ATOM	1721	CB	LYS	B	100	57.734	90.637	-6.641	1.00	17.02	C
ATOM	1722	CG	LYS	B	100	56.878	90.034	-7.734	1.00	17.70	C
ATOM	1723	CD	LYS	B	100	55.439	90.497	-7.635	1.00	20.24	C
ATOM	1724	CE	LYS	B	100	54.570	89.804	-8.673	1.00	22.62	C
ATOM	1725	NZ	LYS	B	100	53.183	90.309	-8.584	1.00	23.99	N
ATOM	1726	N	HIS	B	101	60.169	90.509	-4.453	1.00	16.42	N
ATOM	1727	CA	HIS	B	101	60.988	91.223	-3.460	1.00	16.30	C
ATOM	1728	C	HIS	B	101	62.454	90.793	-3.435	1.00	19.29	C
ATOM	1729	O	HIS	B	101	63.330	91.592	-3.108	1.00	20.13	O
ATOM	1730	CB	HIS	B	101	60.390	91.065	-2.057	1.00	15.10	C
ATOM	1731	CG	HIS	B	101	59.099	91.801	-1.871	1.00	13.77	C
ATOM	1732	ND1	HIS	B	101	59.022	93.018	-1.224	1.00	12.71	N
ATOM	1733	CD2	HIS	B	101	57.846	91.522	-2.300	1.00	10.95	C
ATOM	1734	CE1	HIS	B	101	57.775	93.452	-1.262	1.00	12.58	C
ATOM	1735	NE2	HIS	B	101	57.039	92.562	-1.908	1.00	13.16	N
ATOM	1736	N	GLU	B	102	62.731	89.537	-3.767	1.00	20.43	N
ATOM	1737	CA	GLU	B	102	64.117	89.057	-3.783	1.00	22.40	C
ATOM	1738	C	GLU	B	102	64.182	88.036	-4.906	1.00	22.11	C
ATOM	1739	O	GLU	B	102	63.997	86.836	-4.695	1.00	22.82	O
ATOM	1740	CB	GLU	B	102	64.474	88.437	-2.440	1.00	24.21	C
ATOM	1741	CG	GLU	B	102	65.925	87.969	-2.356	1.00	27.87	C
ATOM	1742	CD	GLU	B	102	66.316	87.592	-0.944	1.00	29.61	C
ATOM	1743	OE1	GLU	B	102	66.475	88.504	-0.100	1.00	30.90	O
ATOM	1744	OE2	GLU	B	102	66.454	86.386	-0.666	1.00	32.61	O
ATOM	1745	N	ALA	B	103	64.438	88.540	-6.108	1.00	23.63	N
ATOM	1746	CA	ALA	B	103	64.440	87.719	-7.311	1.00	25.04	C
ATOM	1747	C	ALA	B	103	65.388	86.533	-7.359	1.00	26.81	C
ATOM	1748	O	ALA	B	103	65.102	85.538	-8.034	1.00	27.34	O
ATOM	1749	CB	ALA	B	103	64.658	88.610	-8.539	1.00	26.60	C
ATOM	1750	N	ASN	B	104	66.502	86.621	-6.641	1.00	27.50	N
ATOM	1751	CA	ASN	B	104	67.482	85.540	-6.658	1.00	27.88	C
ATOM	1752	C	ASN	B	104	67.417	84.646	-5.428	1.00	28.73	C
ATOM	1753	O	ASN	B	104	68.394	83.980	-5.076	1.00	29.82	O
ATOM	1754	CB	ASN	B	104	68.886	86.131	-6.804	1.00	27.94	C
ATOM	1755	CG	ASN	B	104	69.275	87.002	-5.625	1.00	27.82	C
ATOM	1756	OD1	ASN	B	104	68.417	87.637	-4.999	1.00	27.84	O
ATOM	1757	ND2	ASN	B	104	70.573	87.052	-5.322	1.00	28.15	N
ATOM	1758	N	ASN	B	105	66.268	84.619	-4.765	1.00	27.59	N

Forb. Fig. 3 D

ATOM	1759	CA	ASN	B	105	66.145	83.771	-3.595	1.00	27.32	C
ATOM	1760	C	ASN	B	105	66.083	82.311	-4.058	1.00	27.52	C
ATOM	1761	O	ASN	B	105	65.109	81.884	-4.675	1.00	26.00	O
ATOM	1762	CB	ASN	B	105	64.892	84.128	-2.807	1.00	26.30	C
ATOM	1763	CG	ASN	B	105	64.820	83.382	-1.506	1.00	25.60	C
ATOM	1764	OD1	ASN	B	105	64.636	82.170	-1.494	1.00	25.78	O
ATOM	1765	ND2	ASN	B	105	64.986	84.093	-0.400	1.00	25.33	N
ATOM	1766	N	PRO	B	106	67.126	81.525	-3.750	1.00	27.92	N
ATOM	1767	CA	PRO	B	106	67.139	80.121	-4.169	1.00	28.79	C
ATOM	1768	C	PRO	B	106	66.021	79.261	-3.581	1.00	27.49	C
ATOM	1769	O	PRO	B	106	65.499	78.382	-4.254	1.00	28.84	O
ATOM	1770	CB	PRO	B	106	68.525	79.653	-3.735	1.00	28.63	C
ATOM	1771	CG	PRO	B	106	68.717	80.404	-2.453	1.00	29.65	C
ATOM	1772	CD	PRO	B	106	68.229	81.803	-2.809	1.00	28.47	C
ATOM	1773	N	GLN	B	107	65.648	79.509	-2.331	1.00	28.66	N
ATOM	1774	CA	GLN	B	107	64.593	78.707	-1.713	1.00	27.38	C
ATOM	1775	C	GLN	B	107	63.222	78.960	-2.334	1.00	26.37	C
ATOM	1776	O	GLN	B	107	62.411	78.037	-2.462	1.00	23.82	O
ATOM	1777	CB	GLN	B	107	64.542	78.959	-0.208	1.00	29.03	C
ATOM	1778	CG	GLN	B	107	65.802	78.516	0.542	1.00	32.57	C
ATOM	1779	CD	GLN	B	107	67.025	79.369	0.230	1.00	36.21	C
ATOM	1780	OE1	GLN	B	107	66.951	80.597	0.198	1.00	37.07	O
ATOM	1781	NE2	GLN	B	107	68.164	78.716	0.018	1.00	37.24	N
ATOM	1782	N	LEU	B	108	62.951	80.206	-2.715	1.00	24.70	N
ATOM	1783	CA	LEU	B	108	61.668	80.507	-3.326	1.00	23.58	C
ATOM	1784	C	LEU	B	108	61.598	79.917	-4.725	1.00	24.21	C
ATOM	1785	O	LEU	B	108	60.567	79.381	-5.123	1.00	22.79	O
ATOM	1786	CB	LEU	B	108	61.422	82.020	-3.373	1.00	22.64	C
ATOM	1787	CG	LEU	B	108	61.179	82.665	-2.005	1.00	21.35	C
ATOM	1788	CD1	LEU	B	108	60.896	84.147	-2.211	1.00	18.85	C
ATOM	1789	CD2	LEU	B	108	59.988	82.000	-1.294	1.00	19.52	C
ATOM	1790	N	LYS	B	109	62.701	79.999	-5.465	1.00	25.78	N
ATOM	1791	CA	LYS	B	109	62.728	79.451	-6.814	1.00	26.69	C
ATOM	1792	C	LYS	B	109	62.520	77.938	-6.760	1.00	26.21	C
ATOM	1793	O	LYS	B	109	61.794	77.379	-7.577	1.00	26.38	O
ATOM	1794	CB	LYS	B	109	64.064	79.754	-7.498	1.00	29.37	C
ATOM	1795	CG	LYS	B	109	64.264	81.212	-7.876	1.00	32.48	C
ATOM	1796	CD	LYS	B	109	65.607	81.409	-8.567	1.00	36.35	C
ATOM	1797	CE	LYS	B	109	65.908	82.883	-8.773	1.00	37.40	C
ATOM	1798	NZ	LYS	B	109	67.276	83.094	-9.346	1.00	40.31	N
ATOM	1799	N	GLU	B	110	63.153	77.284	-5.790	1.00	27.59	N
ATOM	1800	CA	GLU	B	110	63.033	75.834	-5.639	1.00	28.03	C
ATOM	1801	C	GLU	B	110	61.631	75.444	-5.185	1.00	29.33	C
ATOM	1802	O	GLU	B	110	61.040	74.493	-5.701	1.00	28.14	O
ATOM	1803	CB	GLU	B	110	64.062	75.328	-4.644	1.00	28.29	C
ATOM	1804	N	GLY	B	111	61.099	76.183	-4.217	1.00	30.04	N
ATOM	1805	CA	GLY	B	111	59.767	75.889	-3.723	1.00	30.98	C
ATOM	1806	C	GLY	B	111	58.745	75.953	-4.840	1.00	31.94	C
ATOM	1807	O	GLY	B	111	57.887	75.075	-4.976	1.00	31.23	O
ATOM	1808	N	LEU	B	112	58.844	77.002	-5.651	1.00	33.48	N
ATOM	1809	CA	LEU	B	112	57.939	77.209	-6.770	1.00	34.95	C
ATOM	1810	C	LEU	B	112	58.145	76.138	-7.838	1.00	37.37	C
ATOM	1811	O	LEU	B	112	57.204	75.712	-8.498	1.00	38.64	O
ATOM	1812	CB	LEU	B	112	58.177	78.596	-7.371	1.00	35.01	C
ATOM	1813	CG	LEU	B	112	57.399	78.977	-8.633	1.00	35.75	C
ATOM	1814	CD1	LEU	B	112	55.908	78.911	-8.367	1.00	35.80	C
ATOM	1815	CD2	LEU	B	112	57.803	80.379	-9.075	1.00	34.89	C
ATOM	1816	N	GLN	B	113	59.388	75.706	-7.996	1.00	38.85	N
ATOM	1817	CA	GLN	B	113	59.736	74.693	-8.984	1.00	41.31	C

Forb. Fig. 3 D

ATOM	1818	C	GLN	B	113	59.300	73.300	-8.528	1.00	42.22	C
ATOM	1819	O	GLN	B	113	58.676	72.555	-9.285	1.00	42.71	O
ATOM	1820	CB	GLN	B	113	61.245	74.730	-9.215	1.00	42.25	C
ATOM	1821	CG	GLN	B	113	61.819	73.543	-9.942	1.00	44.97	C
ATOM	1822	CD	GLN	B	113	63.332	73.563	-9.920	1.00	46.55	C
ATOM	1823	OE1	GLN	B	113	63.955	74.504	-10.413	1.00	47.52	O
ATOM	1824	NE2	GLN	B	113	63.933	72.530	-9.336	1.00	46.71	N
ATOM	1825	N	ASN	B	114	59.624	72.960	-7.284	1.00	42.60	N
ATOM	1826	CA	ASN	B	114	59.282	71.654	-6.729	1.00	43.84	C
ATOM	1827	C	ASN	B	114	57.790	71.401	-6.643	1.00	44.23	C
ATOM	1828	O	ASN	B	114	57.354	70.269	-6.435	1.00	44.06	O
ATOM	1829	CB	ASN	B	114	59.910	71.485	-5.346	1.00	44.50	C
ATOM	1830	CG	ASN	B	114	61.421	71.418	-5.407	1.00	45.37	C
ATOM	1831	OD1	ASN	B	114	61.990	71.106	-6.456	1.00	46.29	O
ATOM	1832	ND2	ASN	B	114	62.079	71.691	-4.283	1.00	45.27	N
ATOM	1833	N	MET	B	115	57.001	72.450	-6.803	1.00	44.09	N
ATOM	1834	CA	MET	B	115	55.559	72.292	-6.743	1.00	43.35	C
ATOM	1835	C	MET	B	115	55.021	72.057	-8.153	1.00	42.88	C
ATOM	1836	O	MET	B	115	54.471	70.961	-8.392	1.00	43.46	O
ATOM	1837	CB	MET	B	115	54.927	73.540	-6.124	1.00	44.80	C
ATOM	1838	CG	MET	B	115	53.417	73.481	-5.987	1.00	44.98	C
ATOM	1839	SD	MET	B	115	52.788	75.020	-5.314	1.00	44.57	S
ATOM	1840	CE	MET	B	115	53.709	76.200	-6.325	1.00	39.63	C
TER	1841		MET	B	115						
ATOM	1842	N	GLY	C	5	26.441	59.293	8.000	1.00	40.44	N
ATOM	1843	CA	GLY	C	5	27.273	59.861	9.096	1.00	38.95	C
ATOM	1844	C	GLY	C	5	28.584	59.111	9.245	1.00	38.18	C
ATOM	1845	O	GLY	C	5	28.716	57.995	8.734	1.00	37.99	O
ATOM	1846	N	PRO	C	6	29.579	59.692	9.936	1.00	36.58	N
ATOM	1847	CA	PRO	C	6	30.858	59.000	10.101	1.00	35.29	C
ATOM	1848	C	PRO	C	6	30.738	57.729	10.931	1.00	33.89	C
ATOM	1849	O	PRO	C	6	29.868	57.604	11.796	1.00	35.17	O
ATOM	1850	CB	PRO	C	6	31.746	60.058	10.767	1.00	36.16	C
ATOM	1851	CG	PRO	C	6	30.770	60.882	11.523	1.00	35.52	C
ATOM	1852	CD	PRO	C	6	29.621	61.025	10.562	1.00	36.86	C
ATOM	1853	N	THR	C	7	31.624	56.789	10.641	1.00	32.83	N
ATOM	1854	CA	THR	C	7	31.663	55.505	11.314	1.00	31.30	C
ATOM	1855	C	THR	C	7	32.545	55.629	12.548	1.00	28.01	C
ATOM	1856	O	THR	C	7	33.613	56.221	12.479	1.00	28.30	O
ATOM	1857	CB	THR	C	7	32.310	54.431	10.420	1.00	33.59	C
ATOM	1858	OG1	THR	C	7	31.635	54.377	9.157	1.00	36.63	O
ATOM	1859	CG2	THR	C	7	32.250	53.065	11.102	1.00	34.58	C
ATOM	1860	N	ILE	C	8	32.087	55.094	13.671	1.00	23.79	N
ATOM	1861	CA	ILE	C	8	32.898	55.109	14.874	1.00	21.11	C
ATOM	1862	C	ILE	C	8	33.447	53.684	14.962	1.00	18.34	C
ATOM	1863	O	ILE	C	8	32.713	52.733	15.230	1.00	19.34	O
ATOM	1864	CB	ILE	C	8	32.067	55.444	16.125	1.00	20.16	C
ATOM	1865	CG1	ILE	C	8	31.501	56.867	16.002	1.00	18.29	C
ATOM	1866	CG2	ILE	C	8	32.959	55.343	17.388	1.00	20.32	C
ATOM	1867	CD1	ILE	C	8	30.474	57.220	17.071	1.00	19.80	C
ATOM	1868	N	GLU	C	9	34.744	53.527	14.725	1.00	17.32	N
ATOM	1869	CA	GLU	C	9	35.320	52.188	14.766	1.00	17.52	C
ATOM	1870	C	GLU	C	9	35.345	51.576	16.153	1.00	16.97	C
ATOM	1871	O	GLU	C	9	35.349	52.290	17.148	1.00	16.53	O
ATOM	1872	CB	GLU	C	9	36.731	52.181	14.208	1.00	18.79	C
ATOM	1873	CG	GLU	C	9	36.812	52.471	12.722	1.00	22.45	C
ATOM	1874	CD	GLU	C	9	38.169	52.117	12.162	1.00	24.55	C
ATOM	1875	OE1	GLU	C	9	38.346	50.977	11.662	1.00	28.35	O
ATOM	1876	OE2	GLU	C	9	39.063	52.967	12.231	1.00	23.44	O

Forb. Fig. 3 D

ATOM	1877	N	GLU	C	10	35.370	50.242	16.198	1.00	17.41	N
ATOM	1878	CA	GLU	C	10	35.389	49.489	17.438	1.00	18.84	C
ATOM	1879	C	GLU	C	10	36.609	49.818	18.268	1.00	18.32	C
ATOM	1880	O	GLU	C	10	37.657	50.183	17.739	1.00	18.03	O
ATOM	1881	CB	GLU	C	10	35.402	47.983	17.160	1.00	20.81	C
ATOM	1882	CG	GLU	C	10	34.086	47.435	16.655	1.00	29.32	C
ATOM	1883	CD	GLU	C	10	32.961	47.671	17.645	1.00	32.65	C
ATOM	1884	OE1	GLU	C	10	32.216	48.662	17.478	1.00	36.27	O
ATOM	1885	OE2	GLU	C	10	32.837	46.876	18.605	1.00	36.28	O
ATOM	1886	N	VAL	C	11	36.468	49.663	19.576	1.00	17.18	N
ATOM	1887	CA	VAL	C	11	37.578	49.933	20.462	1.00	16.59	C
ATOM	1888	C	VAL	C	11	38.565	48.772	20.415	1.00	16.24	C
ATOM	1889	O	VAL	C	11	38.224	47.667	19.979	1.00	17.78	O
ATOM	1890	CB	VAL	C	11	37.108	50.151	21.917	1.00	17.75	C
ATOM	1891	CG1	VAL	C	11	36.234	51.423	22.013	1.00	16.61	C
ATOM	1892	CG2	VAL	C	11	36.351	48.928	22.403	1.00	17.47	C
ATOM	1893	N	ASP	C	12	39.779	49.035	20.870	1.00	15.58	N
ATOM	1894	CA	ASP	C	12	40.851	48.040	20.905	1.00	16.61	C
ATOM	1895	C	ASP	C	12	41.206	47.630	22.329	1.00	17.41	C
ATOM	1896	O	ASP	C	12	40.664	48.220	23.289	1.00	17.00	O
ATOM	1897	CB	ASP	C	12	42.080	48.607	20.215	1.00	15.11	C
ATOM	1898	CG	ASP	C	12	41.858	48.807	18.740	1.00	15.07	C
ATOM	1899	OD1	ASP	C	12	41.889	47.804	18.007	1.00	16.39	O
ATOM	1900	OD2	ASP	C	12	41.640	49.954	18.322	1.00	16.05	O
ATOM	1901	OXT	ASP	C	12	42.043	46.714	22.472	1.00	19.91	O
TER	1902		ASP	C	12						
ATOM	1903	N	GLY	D	5	54.310	66.378	-0.246	1.00	36.34	N
ATOM	1904	CA	GLY	D	5	54.140	67.640	0.551	1.00	35.49	C
ATOM	1905	C	GLY	D	5	55.379	68.511	0.513	1.00	34.74	C
ATOM	1906	O	GLY	D	5	56.482	68.012	0.277	1.00	35.12	O
ATOM	1907	N	PRO	D	6	55.234	69.825	0.731	1.00	33.16	N
ATOM	1908	CA	PRO	D	6	56.391	70.723	0.708	1.00	32.69	C
ATOM	1909	C	PRO	D	6	57.322	70.467	1.883	1.00	32.04	C
ATOM	1910	O	PRO	D	6	56.920	69.888	2.890	1.00	31.42	O
ATOM	1911	CB	PRO	D	6	55.750	72.109	0.773	1.00	32.77	C
ATOM	1912	CG	PRO	D	6	54.545	71.867	1.621	1.00	31.53	C
ATOM	1913	CD	PRO	D	6	53.998	70.572	1.024	1.00	32.79	C
ATOM	1914	N	THR	D	7	58.572	70.891	1.751	1.00	32.83	N
ATOM	1915	CA	THR	D	7	59.510	70.714	2.844	1.00	31.75	C
ATOM	1916	C	THR	D	7	59.357	71.897	3.785	1.00	29.25	C
ATOM	1917	O	THR	D	7	58.962	72.989	3.375	1.00	30.15	O
ATOM	1918	CB	THR	D	7	60.958	70.644	2.343	1.00	33.38	C
ATOM	1919	OG1	THR	D	7	61.189	71.708	1.412	1.00	36.12	O
ATOM	1920	CG2	THR	D	7	61.220	69.296	1.677	1.00	34.88	C
ATOM	1921	N	ILE	D	8	59.658	71.667	5.054	1.00	26.07	N
ATOM	1922	CA	ILE	D	8	59.563	72.714	6.059	1.00	22.84	C
ATOM	1923	C	ILE	D	8	60.986	73.208	6.302	1.00	22.09	C
ATOM	1924	O	ILE	D	8	61.829	72.476	6.817	1.00	21.96	O
ATOM	1925	CB	ILE	D	8	58.937	72.147	7.349	1.00	22.32	C
ATOM	1926	CG1	ILE	D	8	57.483	71.737	7.063	1.00	21.53	C
ATOM	1927	CG2	ILE	D	8	59.008	73.174	8.472	1.00	21.75	C
ATOM	1928	CD1	ILE	D	8	56.857	70.871	8.139	1.00	22.43	C
ATOM	1929	N	GLU	D	9	61.266	74.448	5.916	1.00	20.77	N
ATOM	1930	CA	GLU	D	9	62.615	74.963	6.106	1.00	21.52	C
ATOM	1931	C	GLU	D	9	63.046	75.047	7.551	1.00	19.46	C
ATOM	1932	O	GLU	D	9	62.235	75.239	8.450	1.00	17.82	O
ATOM	1933	CB	GLU	D	9	62.772	76.333	5.460	1.00	23.56	C
ATOM	1934	CG	GLU	D	9	62.744	76.295	3.955	1.00	29.57	C
ATOM	1935	CD	GLU	D	9	63.212	77.600	3.357	1.00	33.77	C

Forb. Fig. 3 D

ATOM	1936	OE1	GLU	D	9	62.598	78.642	3.654	1.00	36.33	O
ATOM	1937	OE2	GLU	D	9	64.202	77.587	2.595	1.00	38.37	O
ATOM	1938	N	GLU	D	10	64.350	74.892	7.767	1.00	19.20	N
ATOM	1939	CA	GLU	D	10	64.918	74.958	9.098	1.00	20.17	C
ATOM	1940	C	GLU	D	10	64.565	76.269	9.801	1.00	16.38	C
ATOM	1941	O	GLU	D	10	64.370	77.306	9.154	1.00	17.03	O
ATOM	1942	CB	GLU	D	10	66.443	74.832	9.022	1.00	24.01	C
ATOM	1943	CG	GLU	D	10	66.942	73.547	8.327	1.00	31.90	C
ATOM	1944	CD	GLU	D	10	66.661	72.277	9.129	1.00	35.04	C
ATOM	1945	OE1	GLU	D	10	66.958	72.282	10.345	1.00	39.14	O
ATOM	1946	OE2	GLU	D	10	66.162	71.273	8.548	1.00	36.85	O
ATOM	1947	N	VAL	D	11	64.494	76.215	11.127	1.00	15.90	N
ATOM	1948	CA	VAL	D	11	64.183	77.407	11.928	1.00	15.54	C
ATOM	1949	C	VAL	D	11	65.426	78.286	12.095	1.00	16.76	C
ATOM	1950	O	VAL	D	11	66.565	77.846	11.872	1.00	17.49	O
ATOM	1951	CB	VAL	D	11	63.613	77.062	13.350	1.00	17.29	C
ATOM	1952	CG1	VAL	D	11	62.255	76.367	13.222	1.00	17.25	C
ATOM	1953	CG2	VAL	D	11	64.592	76.200	14.134	1.00	17.88	C
ATOM	1954	N	ASP	D	12	65.196	79.536	12.488	1.00	15.71	N
ATOM	1955	CA	ASP	D	12	66.275	80.500	12.665	1.00	17.76	C
ATOM	1956	C	ASP	D	12	66.485	80.900	14.117	1.00	18.90	C
ATOM	1957	O	ASP	D	12	65.627	80.576	14.966	1.00	17.43	O
ATOM	1958	CB	ASP	D	12	65.961	81.755	11.846	1.00	16.22	C
ATOM	1959	CG	ASP	D	12	65.948	81.481	10.385	1.00	17.41	C
ATOM	1960	OD1	ASP	D	12	67.049	81.292	9.826	1.00	21.94	O
ATOM	1961	OD2	ASP	D	12	64.856	81.433	9.798	1.00	16.64	O
ATOM	1962	OXT	ASP	D	12	67.510	81.558	14.392	1.00	21.83	O
TER	1963	ASP	D	12							
HETATM	1964	NI	NI	B	401	55.055	92.809	-2.272	1.00	14.94	NI
HETATM	1965	NI	NI	A	402	53.108	62.432	9.501	1.00	15.51	NI
HETATM	1966	NI	NI	A	403	55.593	62.366	28.283	0.50	36.28	NI
HETATM	1967	NI	NI	B	404	52.202	96.348	16.463	0.50	36.28	NI
HETATM	1968	C	TRS		301	54.998	62.631	7.073	1.00	18.58	C
HETATM	1969	C1	TRS		301	56.252	63.295	6.499	1.00	19.95	C
HETATM	1970	C2	TRS		301	54.965	61.182	6.566	1.00	18.28	C
HETATM	1971	C3	TRS		301	53.679	63.352	6.603	1.00	17.13	C
HETATM	1972	N	TRS		301	55.185	62.844	8.500	1.00	17.41	N
HETATM	1973	O1	TRS		301	55.950	63.667	5.176	1.00	26.62	O
HETATM	1974	O2	TRS		301	55.952	60.436	7.298	1.00	18.09	O
HETATM	1975	O3	TRS		301	52.528	62.765	7.287	1.00	20.17	O
HETATM	1976	C	TRS		302	52.101	64.546	11.480	1.00	21.30	C
HETATM	1977	C1	TRS		302	51.719	65.938	11.983	1.00	22.90	C
HETATM	1978	C2	TRS		302	50.793	63.715	11.436	1.00	20.67	C
HETATM	1979	C3	TRS		302	53.090	63.815	12.448	1.00	21.10	C
HETATM	1980	N	TRS		302	52.805	64.830	10.220	1.00	21.96	N
HETATM	1981	O1	TRS		302	51.080	66.602	10.935	1.00	24.33	O
HETATM	1982	O2	TRS		302	50.887	62.765	10.367	1.00	19.56	O
HETATM	1983	O3	TRS		302	53.485	62.549	11.846	1.00	20.49	O
HETATM	1984	C	TRS		303	53.442	91.334	-0.739	1.00	16.85	C
HETATM	1985	C1	TRS		303	54.012	92.256	0.360	1.00	17.64	C
HETATM	1986	C2	TRS		303	52.336	92.136	-1.490	1.00	16.81	C
HETATM	1987	C3	TRS		303	52.765	90.093	-0.150	1.00	17.67	C
HETATM	1988	N	TRS		303	54.635	90.850	-1.480	1.00	14.17	N
HETATM	1989	O1	TRS		303	54.705	93.310	-0.244	1.00	18.69	O
HETATM	1990	O2	TRS		303	52.926	92.940	-2.525	1.00	17.96	O
HETATM	1991	O3	TRS		303	52.419	89.236	-1.252	1.00	20.38	O
HETATM	1992	C	TRS		304	55.629	94.469	-4.518	1.00	17.88	C
HETATM	1993	C1	TRS		304	55.163	95.717	-5.269	1.00	19.02	C
HETATM	1994	C2	TRS		304	57.151	94.346	-4.733	1.00	17.99	C

Forb. Fig. 3 D

HETATM 1995	C3	TRS	304	54.955	93.155	-5.070	1.00	18.26	C
HETATM 1996	N	TRS	304	55.149	94.742	-3.159	1.00	15.95	N
HETATM 1997	O1	TRS	304	53.783	95.861	-4.998	1.00	22.18	O
HETATM 1998	O2	TRS	304	57.813	95.318	-3.906	1.00	19.83	O
HETATM 1999	O3	TRS	304	55.348	92.030	-4.233	1.00	17.54	O
HETATM 2000	O	HOH	1	36.448	59.799	16.974	1.00	12.43	O
HETATM 2001	O	HOH	2	47.424	57.345	15.318	1.00	14.06	O
HETATM 2002	O	HOH	3	62.444	80.593	10.480	1.00	15.16	O
HETATM 2003	O	HOH	4	58.712	87.491	5.203	1.00	13.81	O
HETATM 2004	O	HOH	5	40.739	52.157	19.433	1.00	14.03	O
HETATM 2005	O	HOH	6	36.448	55.904	13.835	1.00	17.09	O
HETATM 2006	O	HOH	7	35.727	57.227	16.229	1.00	16.39	O
HETATM 2007	O	HOH	8	27.395	60.260	17.953	1.00	19.27	O
HETATM 2008	O	HOH	9	57.479	75.900	6.745	1.00	16.50	O
HETATM 2009	O	HOH	10	44.952	78.198	-4.034	1.00	17.67	O
HETATM 2010	O	HOH	11	54.863	76.936	7.114	1.00	12.79	O
HETATM 2011	O	HOH	12	56.303	68.625	22.984	1.00	19.19	O
HETATM 2012	O	HOH	13	34.761	72.473	15.882	1.00	20.40	O
HETATM 2013	O	HOH	14	61.384	93.114	4.858	1.00	18.65	O
HETATM 2014	O	HOH	15	46.803	65.439	15.322	1.00	23.85	O
HETATM 2015	O	HOH	16	27.834	55.137	32.427	1.00	21.95	O
HETATM 2016	O	HOH	17	56.064	53.236	13.965	1.00	25.71	O
HETATM 2017	O	HOH	18	63.758	73.379	25.076	1.00	23.22	O
HETATM 2018	O	HOH	19	57.760	86.754	-9.355	1.00	21.67	O
HETATM 2019	O	HOH	20	52.596	67.941	9.138	1.00	19.83	O
HETATM 2020	O	HOH	21	60.110	92.593	12.116	1.00	25.42	O
HETATM 2021	O	HOH	22	53.633	55.454	15.306	1.00	21.68	O
HETATM 2022	O	HOH	23	32.759	72.727	13.881	1.00	21.94	O
HETATM 2023	O	HOH	24	53.417	92.135	3.571	1.00	27.39	O
HETATM 2024	O	HOH	25	54.017	95.366	5.527	1.00	21.54	O
HETATM 2025	O	HOH	26	36.879	57.857	10.171	1.00	26.12	O
HETATM 2026	O	HOH	27	41.528	78.936	-2.676	1.00	27.83	O
HETATM 2027	O	HOH	28	42.249	76.891	4.227	1.00	23.91	O
HETATM 2028	O	HOH	29	33.267	47.534	33.212	1.00	27.67	O
HETATM 2029	O	HOH	30	25.690	62.907	14.899	1.00	29.25	O
HETATM 2030	O	HOH	31	37.299	71.722	7.760	1.00	22.89	O
HETATM 2031	O	HOH	32	38.727	64.699	27.960	1.00	31.20	O
HETATM 2032	O	HOH	33	34.463	71.732	5.550	1.00	28.47	O
HETATM 2033	O	HOH	34	49.034	50.526	23.899	1.00	31.58	O
HETATM 2034	O	HOH	35	24.952	58.193	23.041	1.00	24.74	O
HETATM 2035	O	HOH	36	65.446	73.270	15.766	1.00	27.11	O
HETATM 2036	O	HOH	37	41.036	53.113	10.774	1.00	27.74	O
HETATM 2037	O	HOH	38	56.003	65.429	9.909	1.00	24.55	O
HETATM 2038	O	HOH	39	33.207	47.838	23.904	1.00	26.86	O
HETATM 2039	O	HOH	40	51.973	62.863	15.224	1.00	29.56	O
HETATM 2040	O	HOH	41	51.905	86.546	-0.352	1.00	19.25	O
HETATM 2041	O	HOH	42	32.989	69.188	26.048	1.00	20.04	O
HETATM 2042	O	HOH	43	49.618	84.546	13.451	1.00	28.05	O
HETATM 2043	O	HOH	44	51.938	73.984	22.991	1.00	26.34	O
HETATM 2044	O	HOH	45	29.320	49.529	33.504	1.00	30.57	O
HETATM 2045	O	HOH	46	44.231	76.531	-5.987	1.00	23.50	O
HETATM 2046	O	HOH	47	49.724	90.014	-1.393	1.00	23.11	O
HETATM 2047	O	HOH	48	52.217	52.463	14.647	1.00	27.27	O
HETATM 2048	O	HOH	49	64.035	70.760	24.552	1.00	32.09	O
HETATM 2049	O	HOH	50	49.094	88.647	9.321	1.00	30.05	O
HETATM 2050	O	HOH	51	32.808	59.691	33.056	1.00	26.02	O
HETATM 2051	O	HOH	52	58.004	76.401	0.950	1.00	33.10	O
HETATM 2052	O	HOH	53	56.986	73.246	-3.319	1.00	32.27	O
HETATM 2053	O	HOH	54	60.501	65.696	14.460	1.00	30.80	O

Forb. Fig. 3D

HETATM 2054	O	HOH	55	65.087	91.486	-6.307	1.00	33.03	O
HETATM 2055	O	HOH	56	66.045	74.634	5.613	1.00	31.77	O
HETATM 2056	O	HOH	57	34.008	58.843	5.925	1.00	28.53	O
HETATM 2057	O	HOH	58	54.593	58.570	2.978	1.00	38.78	O
HETATM 2058	O	HOH	59	38.930	53.965	-2.443	1.00	38.51	O
HETATM 2059	O	HOH	60	29.284	64.924	31.120	1.00	36.53	O
HETATM 2060	O	HOH	61	38.128	72.150	17.731	1.00	27.82	O
HETATM 2061	O	HOH	62	33.596	49.394	20.274	1.00	29.05	O
HETATM 2062	O	HOH	63	68.821	77.819	17.890	1.00	33.21	O
HETATM 2063	O	HOH	64	65.253	92.464	-1.523	1.00	25.63	O
HETATM 2064	O	HOH	65	36.785	60.743	34.722	1.00	33.21	O
HETATM 2065	O	HOH	66	49.296	50.444	4.752	1.00	41.60	O
HETATM 2066	O	HOH	67	38.023	55.854	37.577	1.00	42.97	O
HETATM 2067	O	HOH	68	33.384	74.634	11.899	1.00	24.72	O
HETATM 2068	O	HOH	69	42.904	64.690	24.843	1.00	25.13	O
HETATM 2069	O	HOH	70	50.569	82.254	-10.508	1.00	26.55	O
HETATM 2070	O	HOH	71	42.677	45.394	18.412	1.00	21.62	O
HETATM 2071	O	HOH	72	57.065	64.876	21.953	1.00	28.18	O
HETATM 2072	O	HOH	73	64.707	89.221	14.866	1.00	28.76	O
HETATM 2073	O	HOH	74	59.112	76.255	4.566	1.00	25.07	O
HETATM 2074	O	HOH	75	53.086	98.456	16.017	1.00	39.34	O
HETATM 2075	O	HOH	76	44.839	72.042	8.972	1.00	29.54	O
HETATM 2076	O	HOH	77	35.844	55.974	11.236	1.00	30.78	O
HETATM 2077	O	HOH	78	51.946	86.805	-7.056	1.00	24.67	O
HETATM 2078	O	HOH	79	45.619	51.326	11.702	1.00	24.71	O
HETATM 2079	O	HOH	80	50.846	88.271	4.674	1.00	27.05	O
HETATM 2080	O	HOH	81	59.127	94.630	10.574	1.00	33.14	O
HETATM 2081	O	HOH	82	47.891	68.115	3.441	1.00	28.06	O
HETATM 2082	O	HOH	83	61.800	95.221	6.361	1.00	26.78	O
HETATM 2083	O	HOH	84	51.639	84.064	21.439	1.00	29.40	O
HETATM 2084	O	HOH	85	35.362	60.702	32.390	1.00	34.85	O
HETATM 2085	O	HOH	86	29.264	54.327	14.008	1.00	34.42	O
HETATM 2086	O	HOH	87	48.386	86.382	10.595	1.00	31.26	O
HETATM 2087	O	HOH	88	52.139	86.068	-9.644	1.00	25.74	O
HETATM 2088	O	HOH	89	64.987	82.343	1.703	1.00	33.41	O
HETATM 2089	O	HOH	90	35.233	70.303	25.071	1.00	30.87	O
HETATM 2090	O	HOH	91	44.646	73.851	10.643	1.00	26.53	O
HETATM 2091	O	HOH	92	38.951	46.667	17.135	1.00	30.48	O
HETATM 2092	O	HOH	93	61.372	69.628	24.890	1.00	32.47	O
HETATM 2093	O	HOH	94	34.193	44.813	34.167	1.00	35.53	O
HETATM 2094	O	HOH	95	69.359	82.186	10.152	1.00	31.88	O
HETATM 2095	O	HOH	96	48.115	61.088	1.303	1.00	28.29	O
HETATM 2096	O	HOH	97	42.624	67.606	0.950	1.00	37.42	O
HETATM 2097	O	HOH	98	24.535	54.414	25.532	1.00	31.60	O
HETATM 2098	O	HOH	99	52.009	94.554	-6.868	1.00	28.00	O
HETATM 2099	O	HOH	100	39.113	64.583	25.272	1.00	26.38	O
HETATM 2100	O	HOH	101	51.446	92.154	-5.843	1.00	26.60	O
HETATM 2101	O	HOH	102	50.698	65.251	15.257	1.00	35.97	O
HETATM 2102	O	HOH	103	26.388	56.543	30.244	1.00	33.89	O
HETATM 2103	O	HOH	104	33.253	51.917	19.020	1.00	32.07	O
HETATM 2104	O	HOH	105	28.408	52.171	23.705	1.00	33.11	O
HETATM 2105	O	HOH	106	44.861	66.236	10.198	1.00	26.76	O
HETATM 2106	O	HOH	107	39.048	54.743	14.148	1.00	23.97	O
HETATM 2107	O	HOH	108	49.756	61.138	34.334	1.00	41.24	O
HETATM 2108	O	HOH	109	54.938	67.170	20.447	1.00	34.03	O
HETATM 2109	O	HOH	110	52.376	88.940	-10.769	1.00	38.11	O
HETATM 2110	O	HOH	111	52.030	54.841	22.581	1.00	31.90	O
HETATM 2111	O	HOH	112	64.107	73.316	11.939	1.00	29.61	O
HETATM 2112	O	HOH	113	62.344	71.235	9.332	1.00	29.15	O

Figs. 3 D

HETATM 2113	O	HOH	114	35.125	59.603	-4.152	1.00	36.97	O
HETATM 2114	O	HOH	115	63.069	80.610	2.234	1.00	27.62	O
HETATM 2115	O	HOH	116	52.488	93.484	10.488	1.00	36.63	O
HETATM 2116	O	HOH	117	26.478	58.154	16.597	1.00	33.07	O
HETATM 2117	O	HOH	118	40.431	68.909	1.972	1.00	34.25	O
HETATM 2118	O	HOH	119	54.359	95.445	9.002	1.00	34.14	O
HETATM 2119	O	HOH	120	44.581	69.620	8.303	1.00	32.76	O
HETATM 2120	O	HOH	121	48.854	80.779	17.232	1.00	34.20	O
HETATM 2121	O	HOH	122	64.935	84.635	3.120	1.00	32.42	O
HETATM 2122	O	HOH	123	24.938	56.332	27.386	1.00	42.75	O
HETATM 2123	O	HOH	124	37.858	69.519	26.078	1.00	32.91	O
HETATM 2124	O	HOH	125	35.703	48.820	13.676	1.00	26.74	O
HETATM 2125	O	HOH	126	42.136	74.420	2.228	1.00	22.95	O
HETATM 2126	O	HOH	127	53.065	52.200	8.232	1.00	42.30	O
HETATM 2127	O	HOH	128	46.543	64.358	11.018	1.00	30.09	O
HETATM 2128	O	HOH	129	44.313	54.558	39.006	1.00	34.67	O
HETATM 2129	O	HOH	130	51.384	77.280	22.439	1.00	43.54	O
HETATM 2130	O	HOH	131	52.405	53.157	4.139	1.00	32.53	O
HETATM 2131	O	HOH	132	40.476	56.480	-1.302	1.00	30.99	O
HETATM 2132	O	HOH	133	44.757	56.473	37.500	1.00	34.13	O
HETATM 2133	O	HOH	134	61.967	73.335	10.520	1.00	40.90	O
HETATM 2134	O	HOH	135	52.157	66.367	5.738	1.00	23.73	O
HETATM 2135	O	HOH	136	64.419	71.870	13.978	1.00	32.88	O
HETATM 2136	O	HOH	137	24.062	53.826	31.380	1.00	40.92	O
HETATM 2137	O	HOH	138	39.408	44.266	33.391	1.00	28.66	O
HETATM 2138	O	HOH	139	64.138	92.238	5.008	1.00	28.02	O
HETATM 2139	O	HOH	140	56.169	66.418	12.369	1.00	29.15	O
HETATM 2140	O	HOH	141	66.451	86.467	15.445	1.00	38.68	O
HETATM 2141	O	HOH	142	32.871	73.721	9.490	1.00	34.45	O
HETATM 2142	O	HOH	143	44.615	66.764	22.025	1.00	33.73	O
HETATM 2143	O	HOH	144	58.581	84.053	-9.816	1.00	37.75	O
HETATM 2144	O	HOH	145	31.816	49.239	22.194	1.00	37.33	O
HETATM 2145	O	HOH	146	54.906	61.444	20.349	1.00	38.07	O
HETATM 2146	O	HOH	147	42.263	47.824	15.147	1.00	31.41	O
HETATM 2147	O	HOH	148	38.415	58.970	35.588	1.00	34.83	O
HETATM 2148	O	HOH	149	35.379	74.985	15.567	1.00	44.67	O
HETATM 2149	O	HOH	150	33.843	53.381	36.175	1.00	41.58	O
HETATM 2150	O	HOH	151	40.262	78.095	2.784	1.00	30.09	O
HETATM 2151	O	HOH	152	42.064	69.601	11.974	1.00	27.23	O
HETATM 2152	O	HOH	153	66.775	92.028	-4.368	1.00	34.59	O
HETATM 2153	O	HOH	154	37.903	44.163	25.173	1.00	36.26	O
HETATM 2154	O	HOH	155	26.530	67.449	8.713	1.00	28.67	O
HETATM 2155	O	HOH	156	65.860	67.343	13.871	1.00	38.68	O
HETATM 2156	O	HOH	157	45.651	69.051	13.105	1.00	38.12	O
HETATM 2157	O	HOH	158	28.702	68.045	21.752	1.00	24.62	O
HETATM 2158	O	HOH	159	40.340	76.524	0.237	1.00	41.75	O
HETATM 2159	O	HOH	160	43.143	61.336	32.837	1.00	33.85	O
HETATM 2160	O	HOH	161	37.918	52.603	36.950	1.00	40.55	O
HETATM 2161	O	HOH	162	55.717	85.398	27.538	1.00	34.11	O
HETATM 2162	O	HOH	163	30.333	61.352	0.637	1.00	45.93	O
HETATM 2163	O	HOH	164	42.475	70.715	1.798	1.00	35.57	O
HETATM 2164	O	HOH	165	50.926	51.082	12.706	1.00	31.23	O
HETATM 2165	O	HOH	166	47.015	67.330	9.877	1.00	33.04	O
HETATM 2166	O	HOH	167	49.863	85.326	-1.113	1.00	28.31	O
HETATM 2167	O	HOH	168	55.823	51.274	12.544	1.00	37.22	O
HETATM 2168	O	HOH	169	43.257	68.203	10.038	1.00	24.44	O
HETATM 2169	O	HOH	170	69.759	81.734	12.973	1.00	38.38	O
HETATM 2170	O	HOH	171	58.103	63.054	3.932	1.00	29.97	O
HETATM 2171	O	HOH	172	60.538	77.630	-0.377	1.00	30.74	O

Forb. Fig. 3D

HETATM 2172	O	HOH	173	41.574	74.661	7.857	1.00	36.80	O
HETATM 2173	O	HOH	174	67.479	78.923	25.905	1.00	33.77	O
HETATM 2174	O	HOH	175	42.528	81.119	7.048	1.00	30.96	O
HETATM 2175	O	HOH	176	68.073	76.232	24.925	1.00	36.67	O
HETATM 2176	O	HOH	177	43.687	45.124	21.155	1.00	35.25	O
HETATM 2177	O	HOH	178	54.934	56.739	18.157	1.00	28.18	O
HETATM 2178	O	HOH	179	69.059	90.446	-4.862	1.00	38.25	O
HETATM 2179	O	HOH	180	57.542	95.699	12.815	1.00	36.64	O
HETATM 2180	O	HOH	181	43.840	75.745	13.465	1.00	36.83	O
HETATM 2181	O	HOH	182	47.295	66.577	5.391	1.00	27.12	O
HETATM 2182	O	HOH	183	65.253	87.056	1.845	1.00	37.91	O
HETATM 2183	O	HOH	184	26.993	59.671	34.451	1.00	45.75	O
HETATM 2184	O	HOH	185	31.477	65.205	27.567	1.00	33.25	O
HETATM 2185	O	HOH	186	55.954	70.635	-3.013	1.00	46.48	O
HETATM 2186	O	HOH	187	49.825	85.047	18.443	1.00	39.52	O
HETATM 2187	O	HOH	188	51.277	51.647	10.062	1.00	43.28	O
HETATM 2188	O	HOH	189	54.993	67.306	8.080	1.00	36.13	O
HETATM 2189	O	HOH	190	65.307	90.728	0.457	1.00	29.89	O
HETATM 2190	O	HOH	191	59.418	88.656	32.362	1.00	34.25	O
HETATM 2191	O	HOH	192	42.406	51.055	10.249	1.00	39.49	O
HETATM 2192	O	HOH	193	46.490	66.577	1.481	1.00	39.96	O
HETATM 2193	O	HOH	194	48.629	83.763	-2.460	1.00	32.67	O
HETATM 2194	O	HOH	195	44.537	64.833	27.307	1.00	43.85	O
HETATM 2195	O	HOH	196	40.696	71.473	19.426	1.00	36.22	O
HETATM 2196	O	HOH	197	30.356	46.794	32.724	1.00	37.91	O
HETATM 2197	O	HOH	198	64.956	86.943	17.552	1.00	37.58	O
HETATM 2198	O	HOH	199	47.159	87.376	-13.501	1.00	36.65	O
HETATM 2199	O	HOH	200	54.199	63.596	16.177	1.00	40.65	O
HETATM 2200	O	HOH	201	52.757	56.436	29.582	1.00	38.52	O
HETATM 2201	O	HOH	202	30.244	62.207	6.918	1.00	35.57	O
HETATM 2202	O	HOH	203	63.327	80.667	29.142	1.00	42.69	O
HETATM 2203	O	HOH	204	49.230	81.220	14.690	1.00	37.37	O
HETATM 2204	O	HOH	205	42.453	64.447	29.032	1.00	44.26	O
HETATM 2205	O	HOH	206	39.949	58.159	-3.058	1.00	44.04	O
HETATM 2206	O	HOH	207	55.005	66.335	5.519	1.00	39.66	O
HETATM 2207	O	HOH	208	63.335	83.516	28.788	1.00	41.19	O
HETATM 2208	O	HOH	209	67.497	82.357	7.404	1.00	33.00	O
HETATM 2209	O	HOH	210	50.473	72.547	21.046	1.00	38.61	O
HETATM 2210	O	HOH	211	36.361	54.498	36.358	1.00	41.65	O
HETATM 2211	O	HOH	212	32.240	60.448	35.384	1.00	41.55	O
HETATM 2212	O	HOH	213	50.266	66.067	21.891	1.00	42.59	O
HETATM 2213	O	HOH	214	68.229	80.618	18.713	1.00	46.78	O
HETATM 2214	O	HOH	215	29.226	66.294	29.054	1.00	37.87	O
HETATM 2215	O	HOH	216	48.600	65.992	13.314	1.00	34.32	O
HETATM 2216	O	HOH	217	67.230	78.871	5.900	1.00	39.88	O
HETATM 2217	O	HOH	218	57.105	57.271	2.245	1.00	31.87	O
HETATM 2218	O	HOH	219	51.814	95.481	-1.497	1.00	35.32	O
HETATM 2219	O	HOH	220	39.039	50.769	1.246	1.00	40.13	O
HETATM 2220	O	HOH	221	40.780	60.060	36.105	1.00	42.49	O
HETATM 2221	O	HOH	222	47.226	69.945	20.462	1.00	44.75	O
HETATM 2222	O	HOH	223	38.150	74.763	11.267	1.00	42.51	O
HETATM 2223	O	HOH	224	58.741	67.115	12.503	1.00	42.05	O
HETATM 2224	O	HOH	225	63.176	85.382	-9.941	1.00	43.09	O
HETATM 2225	O	HOH	226	59.262	72.986	-1.282	1.00	37.55	O
HETATM 2226	O	HOH	227	28.697	53.770	17.284	1.00	40.40	O
HETATM 2227	O	HOH	228	68.669	83.054	0.710	1.00	45.89	O
HETATM 2228	O	HOH	229	68.586	85.452	18.664	1.00	48.68	O
HETATM 2229	O	HOH	230	48.303	72.951	16.802	1.00	43.67	O
HETATM 2230	O	HOH	231	48.645	68.944	22.552	1.00	50.19	O

Forb. Fig. 3D.

[illegible]

Übersetzung der Beschreibung der Figur 3D

Figur 3D

CHAPERON
KRISTALLSTRUKTUR DER TPR1-DOMAENE VON HOP IM KOMPLEX MIT EINEM HSC70 PEPTID
MOL_ID:1;
MOLEKUEL TPR1-DOMAENE VON HOP
KETTE A,B;
FRAGMENT: N-TERMINALE DOMAENE;
KONSTRUIERT: JA;
MOL_ID 2
MOLEKUEL: HSC70-PEPTID
KETTE: C, D;
KONSTRUIERT: JA
MOL_ID: 1;
ORGANISMUS_WISSENSCHAFTLICH: HOMO SAPIENS;
ORGANISMUS_GEBRAEUCHLICH: MENSCH
EXPRESSIONS_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI
EXPRESSIONS_SYSTEM_GEMEIN: BAKTERIEN
EXPRESSIONS_SYSTEM_PLASMID PPRO-EX-HTA
MOL_ID2:
SYNTHETISCH: JA
ANDERE EINZELHEITEN: DIESE SEQUENZ KOMMT NATUERLICHERWEISE IN MENSCHEN VOR
HOP, TPR-DOMAENE, PEPTID-KOMPLEX, HELIKALER REPEAT, HSC70, HSP70, PROTEIN-
BINDEND
ROENTGENBEUGUNG
C. SCHEUFELER, A. BRINKER, F.U. HARTL, I.MOAREFI
KRISTALLSTRUKTUR DER TPR1-DOMAENE VON HOP IM KOMPLEX MIT EINEM HSC70 PEPTID
ZUR VEROEFFENTLICHUNG VORGESEHEN

AUFLOESUNG 1,6Å

VERFEINERUNG

PROGRAMM: CNS1

AUTHOREN: BRUNGER,ADAMS.....

VERFEINERUNGSZIEL: ENGH UND HUBER

IN DER VERFEINERUNG EINGESETZTE DATEN

OBERER AUFLOESUNGSBEREICH 1,6Å

UNTERER AUFLOESUNGSBEREICH 18,87Å

AUSSCHLUSSKRITERIUM FUER DIE DATEN (SIGMA(F)): KEINES
VOLLSTAENDIGKEIT (ARBEITS UND TEST) 95,8%

ANZAHL DER REFLEXE: 30804

FIT DER IN DER VERFEINERUNG EINGESETZTEN DATEN

KREUZVALIDIERUNGSMETHODE: DURCHGEHEND

WAHL DES TESTDATENSATZES FUER FREIEN R WERT: ZUFUELLIG

R WERT (ARBEITSSATZ): 18%

FREIER R WERT 0,215

GROESSE DES TESTDATENSATZES FUER FREIEN R WERT: 10,1%

ANZAHL DER REFLEXE IM TESTDATENSATZ: 3100

GESCHAETZTER FEHLER DES FREIEN R WERTS: 0,004%

FIT IN DER HOECHSTEN AUFLOESUNGSSCHALE:

ANZAHL DER SCHALEN GESAMT: 6

HOECHSTE AUFLOESUNGSSCHALE: 1,6Å

NIEDRIGSTE AUFLOESUNGSSCHALE: 1,7Å

VOLLSTAENDIGKEIT (FREIE UND ARBEITS) 81%

ANZAHL DER REFLEXE IN DER SCHALE: 3879

R WERT (ARBEIT) 0,244

FREIER R WERT: 0,2640

GROESSE DES TESTSATZES: 10%

Fortsetzung Fig. 3D

ANZAHL DER REFLEXE IM TESTSET: 433
GESCHAETZTER FEHLER DES FREIEN R WERTS IN DER SCAHLE: 0,013

ANZHL DER NICHT WASSERSTOFF ATOME BEI DER VERFEINERUNG
PROTEINATOME: 1959
NUKLEINSAEUREATOME: 0
HETEROATOME: 36
SOLVENSATOME: 245

B WERTE
AUS DEM WILSON PLOT 21,8 Å**2
DURCHSCHNITTLICHER TEMPERATURWERT: 22,2 Å**2
ANISOTROPER TEMPERATURWERT UEBER ALLES
B11 (Å**2): -1.65
B22 (Å**2): -1.65
B33 (Å**2): 3,3
B12 (Å**2): 0
B13 (Å**2): 0
B23 (Å**2): 0

GESCHAETZTER KOORDINATENFEHLER
ESD (GESCHAETZTE STANDARDABWEICHUNG) AUS LUZATTI-PLOT: 0,16 Å**2
ESD AUS SIGMAA: 0,13Å**2
UNTERE AUFLUESUNGSGRENZE: 5Å

KREUZVALIDIERTER GESCHAETZTER KOORDINATENFEHLER
ESD AUS C-V LUZATTI-PLOT: 0,12 Å**2
ESD AUS C-VSIGMAA: 0,14Å**2

RMS ABWEICHUNGEN VON DEN IDEALEN WERTEN
BINDUNGSLAENGEN: 0,008Å
BINDUNGSWINKEL: 1,3 GRAD
DIEDERWINKEL: 17,8 GRAD
IMPROPER WINKEL: 0,77 GRAD

ISOTROPISCHES THERMISCHES MODELL: RESTRAINED

ISOTROPE RESTRAINTS DER TEMPERATURFAKTOREN
HAUPTKETTENBINDUNGEN: 1,13 Å**2; 1,5 SIGMA
HAUPTKETTENWINKEL: 1,72 Å**2; 2 SIGMA
SEITEKETTENBINDUNGEN: 2,27 Å**2; 2 SIGMA
SEITENKETTENWINKEL: 3,43 Å**2; 2,5 SIGMA

MASSENSOLVES MODELLIERUNG
BENUTZTE METHODE: FLACHES MODELL
KSOL: 0,42
BSOL: 46,36

NCS MODELL: KEINES

NCS RESTRAINTS: KEINE

PARAMETER DATEI 1: PROTEIN.REP.PA
PARAMETER DATEI 2: WATER.REP.PARA
PARAMETER DATEI 3: ION.PAR
PARAMETER DATEI 4: TRS.PAR

TOPOLOGIEDATEI 1: PROTEIN.TOP

Fortsetzung Fig. 3D

TOPOLOGIEDATEI 2: TRS.TOP
TOPOLOGIEDATEI 3: ION.TOP
TOPOLOGIEDATEI 4: WATER.TOP

WEITERE BEMERKUNGEN ZUR VERFEINERUNG: KEINE

1ELW IST MIT FORMAT V.2.3, 09-JULI-1998 KONFORM

DIESER EINTRAG WURDE VOM RCSB AM 21-MAR-2000 PROZESSIERT.
DER RCSB KODE IST RCSB010712

DETAILS DES EXPERIMENTS
ART DES EXPERIMENTS: ROENTGENBEUGUNG
DATUM DER DATENSAMMLUNG: 10.2.1999
TEMPERATUR: 100K
PH: 8.5
ANZAHL DER VERWENDETEN KRISTALLE: 1

SYNCHROTRON: JA
STRAHLENQUELLE: NSLS
BEAMLINE: X12B
ROENTGENGENERATOR: KEINER
MONOCHROMATISCH
WELLENLAENGE: 0,949Å
KEIN MONOCHROMATOR
KEINE OPTIK

DETEKTORART: CCD
HERSTELLER: ADSC-QUANTUM4
PROTGRAMM ZUR INTEGRATION DR INTENSITAETEN: DENZO
SKALIERUNGSPROGRAMM: SCALEPACK

ANZAHL DER EINZIGARTIGEN REFLEXE: K/A
OBERES AUFLÖSUNGSLIMIT: 1,6Å
UNTERES: 20,0Å
AUSSCHLUSSKRITERIEN (SIGMA(I)): 0,0

UEBER ALLES
VOLLSTAENDIGKEIT: 95,8%
REDUNDANZ DER DATEN: 0,0
R MERGE (I): 0,041
R SYM (I): KEINER
<I/SIGMA(I)> FUER DEN DATENSATZ: 32,5

IN DER HOECHSTEN AUFLÖSUNGSSCHALE
OBERE GRENZE: 1,6Å
UNTERE GRENZE: 1,66Å
VOLLSTAENDIGKEIT DIESER SCHALE: 75,2%
REDUNDANZ IN DIESER SCHALE: 0
R MERGE IN DIESER SCHALE: 0,305
R SYM IN DIESER SCHALE: KEINER
<I/SIGMA(I)> FUER DIESE SCHALE: KEINE

BEUGUNGS PROTOKOLL: EINZELNE WELLENLAENGE
METHODE DER STRUKTURBESTIMMUNG: KEINE
VERWENDETES PROGRAMM: AMORE
AUSGANGSMODELL: KEINES

ANMERKUNG: KEINE

KRISTALL
LÖSUNGSMITTEL GEHALT: VS (%) : NULL

Fortsetzung Fig. 3D

MATTHEWS KOEFFIZIENT: VM ($\text{\AA}^3/\text{DA}$) : NULL

KRISTALLISATIONSBEDINGUNGEN: PEG MME 2000, TRIS, NICKEL CHLORID, XYLIT

KRISTALLSYMMETRIE

SYMMETRIOPERATOREN FUER RAUMGRUPPE P41

....

wobei NNN → OPERATIONSNUMMER

MMM → TRANSLATIONSVEKTOR

KRISTALLOGRAPHISCHE SYMMETRIETRANSFORMATION

DIE FOLGENDEN TRANSFORMATIONEN GELTEN FÜR ATOM/HETATM

....

BIOMOLEKUEL 1,2

DIESER EINTRAG BEINHALTET DIE KRISTALLOGRAPHISCHE ASYMMETRISCHE EINHEIT WELCHE AUS VIER KETTEN BESTEHT. ANMERKUNG 350 ENTHAELT DIE ANWEISUNGEN UEBER DIE ZUSAMMENSETZUNG DER BIOLOGISCH RELEVANTEN KOMPLEXE:

ERZEUGUNG DES BIOMOLEKUELS

KOORDINATEN FUER EIN MULTIMER WELCHES DEN BEKANNTEN OLIGOMERISIERUNGSZUSTAND REPRÄSENTIERT

DAS MOLEKUEL KANN DURCH DIE IM FOLGENDEN ANGEgebenEN BIOMT TRANSFORMATIONEN ERZEUGT WERDEN. SOWOHL DIE KRISTALLOGRAPHISCHEN ALS AUCH DIE NICHT-KRISTALLOGRAPHISCHEN OPERATIONEN SIND ANGEgeben.

BIOMOLEKUEL: 1

FOLGENDES AUF KETTEN A UND C ANWENDEN:

...

BIOMOLEKUEL: 2

FOLGENDES AUF KETTEN B UND D ANWENDEN:

...

FEHLENDE RESTE

FOLGENDE RESTE KONNTEN NICHT EXPERIMENTELL LOKALISIERT WERDEN. (M=MODELL NUMMER; RES=NAME DES RESTES; C=KETTE; SSSEQ=POSITION IN DER SEQUENZ; I=INSERTIONSKODE)

M RES C SSSEQI

MET A 1

GLU B 116

ALA B 117

ARG B 118

FEHLENDE ATOME

FOLGENDE RESTE WEISEN FEHLENDE ATOME AUF. (M=MODELL NUMMER; RES=NAME DES RESTES; C=KETTE; SSSEQ=POSITION IN DER SEQUENZ; I=INSERTIONSKODE)

M RES CSSSEQI ATOMS

...

GEOMETIE UND STEREOCHEMIE

UNTERTHEMA: LAENGE DER KOVALENTEN BINDUNGEN

Fortsetzung Fig. 3D

DIE STEREOCHEMISCHEN PARAMETER DER FOLGENDEN RESTE HABEN WERTE, DIE VON DEN ERWARTUNGSWERTEN UM MEHR ALS 6*RMSD ABWEICHEN. (M=MODELL NUMMER; RES=NAME DES RESTES; C=KETTE; SSSEQ=POSITION IN DER SEQUENZ; I=INSERTIONSKODE)

STANDARD TABELLE
FORMAT ...

ERWARTETE WERTE: ENGH UND HUBER, 1991

...

GEOMETRIE UND STEREOCHEMIE
UNTERTHEMA: WINKEL KOVALENTER BINDUNGEN

DIE STEREOCHEMISCHEN PARAMETER DER FOLGENDEN RESTE HABEN WERTE, DIE VON DEN ERWARTUNGSWERTEN UM MEHR ALS 6*RMSD ABWEICHEN. (M=MODELL NUMMER; RES=NAME DES RESTES; C=KETTE; SSSEQ=POSITION IN DER SEQUENZ; I=INSERTIONSKODE)

STANDARDTABELLE:
FORMAT:

...

Fig. 3E

```

HEADER      CHAPERONE                                14-MAR-00  1ELR
TITLE       CRYSTAL STRUCTURE OF THE TPR2A-DOMAIN OF HOP IN COMPLEX
TITLE       2 WITH THE HSP90-PEPTIDE MEEVD
COMPND      MOL_ID: 1;
COMPND      2 MOLECULE: TPR2A-DOMAIN OF HOP;
COMPND      3 CHAIN: A;
COMPND      4 FRAGMENT: MIDDLE DOMAIN;
COMPND      5 ENGINEERED: YES;
COMPND      6 MOL_ID: 2;
COMPND      7 MOLECULE: HSP90-PEPTIDE MEEVD;
COMPND      8 CHAIN: B;
COMPND      9 FRAGMENT: C-TERMINAL PENTAPEPTIDE;
COMPND     10 ENGINEERED: YES
SOURCE      MOL_ID: 1;
SOURCE      2 ORGANISM_SCIENTIFIC: HOMO SAPIENS;
SOURCE      3 ORGANISM_COMMON: HUMAN;
SOURCE      4 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE      5 EXPRESSION_SYSTEM_COMMON: BACTERIA;
SOURCE      6 EXPRESSION_SYSTEM_PLASMID: PPRO EX HTA;
SOURCE      7 MOL_ID: 2;
SOURCE      8 SYNTHETIC: YES;
SOURCE      9 OTHER_DETAILS: THIS SEQUENCE OCCURS NATURALLY IN HUMANS
KEYWDS      HOP, TPR-DOMAIN, PEPTIDE-COMPLEX, HELICAL REPEAT, HSP90,
KEYWDS     2 PROTEIN BINDING
EXPDTA      X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR      C. SCHEUFLE, A. BRINKER, F. U. HARTL, I. MOAREFI
JRNL        AUTH  C. SCHEUFLE, A. BRINKER, F. U. HARTL, I. MOAREFI
JRNL        TITL  CRYSTAL STRUCTURE OF THE TPR2A-DOMAIN OF HOP IN
JRNL        TITL 2 COMPLEX WITH THE HSP90-PEPTIDE MEEVD
JRNL        REF   TO BE PUBLISHED
JRNL        REFN
REMARK      1
REMARK      2
REMARK      2 RESOLUTION. 1.90 ANGSTROMS.
REMARK      3
REMARK      3 REFINEMENT.
REMARK      3   PROGRAM      : CNS 1.0
REMARK      3   AUTHORS      : BRUNGER, ADAMS, CLORE, DELANO, GROS, GROSSE-
REMARK      3                  : KUNSTLEVE, JIANG, KUSZEWSKI, NILGES, PANNU,
REMARK      3                  : READ, RICE, SIMONSON, WARREN
REMARK      3
REMARK      3 REFINEMENT TARGET : ENGH & HUBER
REMARK      3
REMARK      3 DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK      3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 1.90
REMARK      3 RESOLUTION RANGE LOW  (ANGSTROMS) : 9.93
REMARK      3 DATA CUTOFF                    (SIGMA(F)) : 0.000
REMARK      3 OUTLIER CUTOFF HIGH (RMS(ABS(F))) : NULL
REMARK      3 COMPLETENESS (WORKING+TEST) (%) : 97.5
REMARK      3 NUMBER OF REFLECTIONS              : 10220
REMARK      3
REMARK      3 FIT TO DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK      3 CROSS-VALIDATION METHOD              : THROUGHOUT
REMARK      3 FREE R VALUE TEST SET SELECTION      : RANDOM
REMARK      3 R VALUE                                (WORKING SET) : 0.181
REMARK      3 FREE R VALUE                          : 0.219
REMARK      3 FREE R VALUE TEST SET SIZE (%)       : 9.800
REMARK      3 FREE R VALUE TEST SET COUNT          : 1003

```

Fig. 3E

```

REMARK 3 ESTIMATED ERROR OF FREE R VALUE : 0.007
REMARK 3
REMARK 3 FIT IN THE HIGHEST RESOLUTION BIN.
REMARK 3 TOTAL NUMBER OF BINS USED : 6
REMARK 3 BIN RESOLUTION RANGE HIGH (A) : 1.90
REMARK 3 BIN RESOLUTION RANGE LOW (A) : 2.02
REMARK 3 BIN COMPLETENESS (WORKING+TEST) (%) : 93.80
REMARK 3 REFLECTIONS IN BIN (WORKING SET) : 1453
REMARK 3 BIN R VALUE (WORKING SET) : 0.2220
REMARK 3 BIN FREE R VALUE : 0.2940
REMARK 3 BIN FREE R VALUE TEST SET SIZE (%) : 9.90
REMARK 3 BIN FREE R VALUE TEST SET COUNT : 160
REMARK 3 ESTIMATED ERROR OF BIN FREE R VALUE : 0.023
REMARK 3
REMARK 3 NUMBER OF NON-HYDROGEN ATOMS USED IN REFINEMENT.
REMARK 3 PROTEIN ATOMS : 1086
REMARK 3 NUCLEIC ACID ATOMS : 0
REMARK 3 HETEROGEN ATOMS : 1
REMARK 3 SOLVENT ATOMS : 151
REMARK 3
REMARK 3 B VALUES.
REMARK 3 FROM WILSON PLOT (A**2) : 15.30
REMARK 3 MEAN B VALUE (OVERALL, A**2) : 19.20
REMARK 3 OVERALL ANISOTROPIC B VALUE.
REMARK 3 B11 (A**2) : 1.96000
REMARK 3 B22 (A**2) : 3.43000
REMARK 3 B33 (A**2) : -5.39000
REMARK 3 B12 (A**2) : 0.00000
REMARK 3 B13 (A**2) : 0.46000
REMARK 3 B23 (A**2) : 0.00000
REMARK 3
REMARK 3 ESTIMATED COORDINATE ERROR.
REMARK 3 ESD FROM LUZZATI PLOT (A) : 0.19
REMARK 3 ESD FROM SIGMAA (A) : 0.120
REMARK 3 LOW RESOLUTION CUTOFF (A) : 5.00
REMARK 3
REMARK 3 CROSS-VALIDATED ESTIMATED COORDINATE ERROR.
REMARK 3 ESD FROM C-V LUZZATI PLOT (A) : 0.23
REMARK 3 ESD FROM C-V SIGMAA (A) : 0.17
REMARK 3
REMARK 3 RMS DEVIATIONS FROM IDEAL VALUES.
REMARK 3 BOND LENGTHS (A) : 0.008
REMARK 3 BOND ANGLES (DEGREES) : 1.20
REMARK 3 DIHEDRAL ANGLES (DEGREES) : 17.80
REMARK 3 IMPROPER ANGLES (DEGREES) : 0.77
REMARK 3
REMARK 3 ISOTROPIC THERMAL MODEL : RESTRAINED
REMARK 3
REMARK 3 ISOTROPIC THERMAL FACTOR RESTRAINTS. RMS SIGMA
REMARK 3 MAIN-CHAIN BOND (A**2) : 1.18 ; 1.500
REMARK 3 MAIN-CHAIN ANGLE (A**2) : 1.81 ; 2.000
REMARK 3 SIDE-CHAIN BOND (A**2) : 1.92 ; 2.000
REMARK 3 SIDE-CHAIN ANGLE (A**2) : 2.98 ; 2.500
REMARK 3
REMARK 3
REMARK 3 BULK SOLVENT MODELING.
REMARK 3 METHOD USED : FLAT MODEL
REMARK 3 KSOL : 0.42
REMARK 3 BSOL : 47.21

```

Forb. Fig 3 E

REMARK 3
REMARK 3 NCS MODEL : NULL
REMARK 3
REMARK 3 NCS RESTRAINTS. RMS SIGMA/WEIGHT
REMARK 3 GROUP 1 POSITIONAL (A) : NULL ; NULL
REMARK 3 GROUP 1 B-FACTOR (A**2) : NULL ; NULL
REMARK 3
REMARK 3 PARAMETER FILE 1 : PROTEIN_REP.PA
REMARK 3 PARAMETER FILE 2 : WATER_REP.PARA
REMARK 3 PARAMETER FILE 3 : ION.PARAM
REMARK 3 PARAMETER FILE 4 : CAPPING.PARAM
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 1 : PROTEIN.TOP
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 2 : ION.TOPM
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 3 : CAPPING.TOP
REMARK 3 TOPOLOGY FILE 4 : NULL
REMARK 3
REMARK 3 OTHER REFINEMENT REMARKS: NULL
REMARK 4
REMARK 4 1ELR COMPLIES WITH FORMAT V. 2.3, 09-JULY-1998
REMARK 100
REMARK 100 THIS ENTRY HAS BEEN PROCESSED BY RCSB ON 21-MAR-2000.
REMARK 100 THE RCSB ID CODE IS RCSB010709.
REMARK 200
REMARK 200 EXPERIMENTAL DETAILS
REMARK 200 EXPERIMENT TYPE : X-RAY DIFFRACTION
REMARK 200 DATE OF DATA COLLECTION : 10-05-1999
REMARK 200 TEMPERATURE (KELVIN) : 100.0
REMARK 200 PH : 8.50
REMARK 200 NUMBER OF CRYSTALS USED : 1
REMARK 200
REMARK 200 SYNCHROTRON (Y/N) : Y
REMARK 200 RADIATION SOURCE : ESRF
REMARK 200 BEAMLINE : ID14-3
REMARK 200 X-RAY GENERATOR MODEL : NULL
REMARK 200 MONOCHROMATIC OR LAUE (M/L) : M
REMARK 200 WAVELENGTH OR RANGE (A) : 0.9402
REMARK 200 MONOCHROMATOR : NULL
REMARK 200 OPTICS : NULL
REMARK 200
REMARK 200 DETECTOR TYPE : CCD
REMARK 200 DETECTOR MANUFACTURER : MARRESEARCH
REMARK 200 INTENSITY-INTEGRATION SOFTWARE : MAR
REMARK 200 DATA SCALING SOFTWARE : XDS
REMARK 200
REMARK 200 NUMBER OF UNIQUE REFLECTIONS : NULL
REMARK 200 RESOLUTION RANGE HIGH (A) : 1.900
REMARK 200 RESOLUTION RANGE LOW (A) : 15.000
REMARK 200 REJECTION CRITERIA (SIGMA(I)) : 0.000
REMARK 200
REMARK 200 OVERALL.
REMARK 200 COMPLETENESS FOR RANGE (%) : 97.1
REMARK 200 DATA REDUNDANCY : 0.000
REMARK 200 R MERGE (I) : 0.03800
REMARK 200 R SYM (I) : NULL
REMARK 200 <I/SIGMA(I)> FOR THE DATA SET : 22.8000
REMARK 200
REMARK 200 IN THE HIGHEST RESOLUTION SHELL.
REMARK 200 HIGHEST RESOLUTION SHELL, RANGE HIGH (A) : 1.90
REMARK 200 HIGHEST RESOLUTION SHELL, RANGE LOW (A) : 1.95

Forb. Fig 3E

REMARK 200 COMPLETENESS FOR SHELL (%) : 91.7
 REMARK 200 DATA REDUNDANCY IN SHELL : 0.00
 REMARK 200 R MERGE FOR SHELL (I) : 0.06800
 REMARK 200 R SYM FOR SHELL (I) : NULL
 REMARK 200 <I/SIGMA(I)> FOR SHELL : NULL
 REMARK 200
 REMARK 200 DIFFRACTION PROTOCOL: SINGLE WAVELENGTH
 REMARK 200 METHOD USED TO DETERMINE THE STRUCTURE: NULL
 REMARK 200 SOFTWARE USED: MLPHARE
 REMARK 200 STARTING MODEL: NULL
 REMARK 200
 REMARK 200 REMARK: NULL
 REMARK 280
 REMARK 280 CRYSTAL
 REMARK 280 SOLVENT CONTENT, VS (%) : NULL
 REMARK 280 MATTHEWS COEFFICIENT, VM (ANGSTROMS**3/DA) : NULL
 REMARK 280
 REMARK 280 CRYSTALLIZATION CONDITIONS: PEG MME 2000, TRIS, NICKEL
 REMARK 280 CHLORIDE, XYLITOL
 REMARK 290
 REMARK 290 CRYSTALLOGRAPHIC SYMMETRY
 REMARK 290 SYMMETRY OPERATORS FOR SPACE GROUP: C 1 2 1
 REMARK 290

SYNOP	SYMMETRY
NNNMMM	OPERATOR
1555	X,Y,Z
2555	-X,Y,-Z
3555	1/2+X,1/2+Y,Z
4555	1/2-X,1/2+Y,-Z

 REMARK 290
 REMARK 290 WHERE NNN -> OPERATOR NUMBER
 REMARK 290 MMM -> TRANSLATION VECTOR
 REMARK 290
 REMARK 290 CRYSTALLOGRAPHIC SYMMETRY TRANSFORMATIONS
 REMARK 290 THE FOLLOWING TRANSFORMATIONS OPERATE ON THE ATOM/HETATM
 REMARK 290 RECORDS IN THIS ENTRY TO PRODUCE CRYSTALLOGRAPHICALLY
 REMARK 290 RELATED MOLECULES.

SMTRY1	1	1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
SMTRY2	1	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
SMTRY3	1	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000
SMTRY1	2	-1.000000	0.000000	0.000000	0.000000
SMTRY2	2	0.000000	1.000000	0.000000	0.000000
SMTRY3	2	0.000000	0.000000	-1.000000	0.000000
SMTRY1	3	1.000000	0.000000	0.000000	36.64000
SMTRY2	3	0.000000	1.000000	0.000000	24.13500
SMTRY3	3	0.000000	0.000000	1.000000	0.000000
SMTRY1	4	-1.000000	0.000000	0.000000	36.64000
SMTRY2	4	0.000000	1.000000	0.000000	24.13500
SMTRY3	4	0.000000	0.000000	-1.000000	0.000000

 REMARK 290
 REMARK 290 REMARK: NULL
 REMARK 300
 REMARK 300 BIOMOLECULE: 1
 REMARK 300 THIS ENTRY CONTAINS THE CRYSTALLOGRAPHIC ASYMMETRIC UNIT
 REMARK 300 WHICH CONSISTS OF 2 CHAIN(S). SEE REMARK 350 FOR
 REMARK 300 INFORMATION ON GENERATING THE BIOLOGICAL MOLECULE(S).
 REMARK 350
 REMARK 350 GENERATING THE BIOMOLECULE
 REMARK 350 COORDINATES FOR A COMPLETE MULTIMER REPRESENTING THE KNOWN

Forb. Fig 3E

REMARK 350 BIOLOGICALLY SIGNIFICANT OLIGOMERIZATION STATE OF THE
 REMARK 350 MOLECULE CAN BE GENERATED BY APPLYING BIOMT TRANSFORMATIONS
 REMARK 350 GIVEN BELOW. BOTH NON-CRYSTALLOGRAPHIC AND
 REMARK 350 CRYSTALLOGRAPHIC OPERATIONS ARE GIVEN.
 REMARK 350
 REMARK 350 BIOMOLECULE: 1
 REMARK 350 APPLY THE FOLLOWING TO CHAINS: A, B
 REMARK 350 BIOMT1 1 1.000000 0.000000 0.000000 0.00000
 REMARK 350 BIOMT2 1 0.000000 1.000000 0.000000 0.00000
 REMARK 350 BIOMT3 1 0.000000 0.000000 1.000000 0.00000
 REMARK 375
 REMARK 375 SPECIAL POSITION
 REMARK 375 THE FOLLOWING ATOMS ARE FOUND TO BE WITHIN 0.15 ANGSTROMS
 REMARK 375 OF A SYMMETRY RELATED ATOM AND ARE ASSUMED TO BE ON SPECIAL
 REMARK 375 POSITIONS.
 REMARK 375
 REMARK 375 ATOM RES CSSEQI
 REMARK 375 HOH 90 LIES ON A SPECIAL POSITION.
 REMARK 465
 REMARK 465 MISSING RESIDUES
 REMARK 465 THE FOLLOWING RESIDUES WERE NOT LOCATED IN THE
 REMARK 465 EXPERIMENT. (M=MODEL NUMBER; RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN
 REMARK 465 IDENTIFIER; SSSEQ=SEQUENCE NUMBER; I=INSERTION CODE.)
 REMARK 465
 REMARK 465 M RES C SSSEQI
 REMARK 465 GLU A 350
 REMARK 465 ARG A 351
 REMARK 465 LEU A 352
 REMARK 470
 REMARK 470 MISSING ATOM
 REMARK 470 THE FOLLOWING RESIDUES HAVE MISSING ATOMS (M=MODEL NUMBER;
 REMARK 470 RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN IDENTIFIER; SSEQ=SEQUENCE NUMBER;
 REMARK 470 I=INSERTION CODE):
 REMARK 470 M RES CSSEQI ATOMS
 REMARK 470 GLU A 291 CG CD OE1 OE2
 REMARK 470 ASN A 292 CG OD1 ND2
 REMARK 470 ARG A 293 CG CD NE CZ NH1 NH2
 REMARK 470 GLU A 294 CG CD OE1 OE2
 REMARK 470 GLU A 348 CG CD OE1 OE2
 REMARK 500
 REMARK 500 GEOMETRY AND STEREOCHEMISTRY
 REMARK 500 SUBTOPIC: COVALENT BOND ANGLES
 REMARK 500
 REMARK 500 THE STEREOCHEMICAL PARAMETERS OF THE FOLLOWING RESIDUES
 REMARK 500 HAVE VALUES WHICH DEVIATE FROM EXPECTED VALUES BY MORE
 REMARK 500 THAN 6*RMSD (M=MODEL NUMBER; RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN
 REMARK 500 IDENTIFIER; SSEQ=SEQUENCE NUMBER; I=INSERTION CODE).
 REMARK 500
 REMARK 500 STANDARD TABLE:
 REMARK 500 FORMAT: (10X,I3,1X,A3,1X,A1,I4,A1,3(1X,A4,2X),12X,F5.1)
 REMARK 500
 REMARK 500 EXPECTED VALUES: ENGH AND HUBER, 1991
 REMARK 500
 REMARK 500 M RES CSSEQI ATM1 ATM2 ATM3
 REMARK 500 ASP A 240 N - CA - C ANGL. DEV. = -7.5 DEGREES
 REMARK 500 PRO A 256 N - CA - C ANGL. DEV. = 8.2 DEGREES
 REMARK 500 ARG A 293 N - CA - C ANGL. DEV. = 7.6 DEGREES
 REMARK 500 LYS A 315 N - CA - C ANGL. DEV. = -7.7 DEGREES
 REMARK 500 TYR A 316 N - CA - C ANGL. DEV. = 10.7 DEGREES

Forb. Fig 3E

REMARK 900
 REMARK 900 RELATED ENTRIES
 REMARK 900 RELATED ID: 1ELW RELATED DB: PDB
 DBREF 1ELR A 222 352 SWS P31948 IEFS_HUMAN 222 352
 SEQADV 1ELR GLY A 222 SWS P31948 LYS 222 CONFLICT
 SEQRES 1 A 131 GLY LYS GLN ALA LEU LYS GLU LYS GLU LEU GLY ASN ASP
 SEQRES 2 A 131 ALA TYR LYS LYS LYS ASP PHE ASP THR ALA LEU LYS HIS
 SEQRES 3 A 131 TYR ASP LYS ALA LYS GLU LEU ASP PRO THR ASN MET THR
 SEQRES 4 A 131 TYR ILE THR ASN GLN ALA ALA VAL TYR PHE GLU LYS GLY
 SEQRES 5 A 131 ASP TYR ASN LYS CYS ARG GLU LEU CYS GLU LYS ALA ILE
 SEQRES 6 A 131 GLU VAL GLY ARG GLU ASN ARG GLU ASP TYR ARG GLN ILE
 SEQRES 7 A 131 ALA LYS ALA TYR ALA ARG ILE GLY ASN SER TYR PHE LYS
 SEQRES 8 A 131 GLU GLU LYS TYR LYS ASP ALA ILE HIS PHE TYR ASN LYS
 SEQRES 9 A 131 SER LEU ALA GLU HIS ARG THR PRO ASP VAL LEU LYS LYS
 SEQRES 10 A 131 CYS GLN GLN ALA GLU LYS ILE LEU LYS GLU GLN GLU ARG
 SEQRES 11 A 131 LEU
 SEQRES 1 B 6 ACE MET GLU GLU VAL ASP
 HET ACE B 0 3
 HET NI A 200 1
 HETNAM ACE ACETYL GROUP
 HETNAM NI NICKEL (II) ION
 FORMUL 2 ACE C2 H3 O1
 FORMUL 3 NI NI1 2+
 FORMUL 4 HOH *151(H2 O1)
 HELIX 1 1 GLY A 222 LYS A 238 1 17
 HELIX 2 2 ASP A 240 ASP A 255 1 16
 HELIX 3 3 ASN A 258 GLY A 273 1 16
 HELIX 4 4 ASP A 274 ASN A 292 1 19
 HELIX 5 5 ASP A 295 GLU A 313 1 19
 HELIX 6 6 LYS A 315 HIS A 330 1 16
 HELIX 7 7 THR A 332 GLN A 349 1 18
 CRYST1 73.280 48.270 38.060 90.00 91.30 90.00 C 1 2 1 4
 ORIGX1 1.000000 0.000000 0.000000 0.000000
 ORIGX2 0.000000 1.000000 0.000000 0.000000
 ORIGX3 0.000000 0.000000 1.000000 0.000000
 SCALE1 0.013646 0.000000 0.000310 0.000000
 SCALE2 0.000000 0.020717 0.000000 0.000000
 SCALE3 0.000000 0.000000 0.026281 0.000000
 ATOM 1 N GLY A 222 1.040 11.188 24.111 1.00 40.84 N
 ATOM 2 CA GLY A 222 2.317 10.954 23.362 1.00 40.24 C
 ATOM 3 C GLY A 222 3.553 11.192 24.210 1.00 39.66 C
 ATOM 4 O GLY A 222 4.638 10.706 23.888 1.00 41.35 O
 ATOM 5 N LYS A 223 3.383 11.939 25.295 1.00 37.97 N
 ATOM 6 CA LYS A 223 4.471 12.263 26.212 1.00 36.00 C
 ATOM 7 C LYS A 223 5.340 11.089 26.661 1.00 33.36 C
 ATOM 8 O LYS A 223 6.564 11.125 26.504 1.00 33.00 O
 ATOM 9 CB LYS A 223 3.903 12.949 27.446 1.00 37.66 C
 ATOM 10 CG LYS A 223 4.874 13.062 28.600 1.00 39.85 C
 ATOM 11 CD LYS A 223 4.203 13.718 29.795 1.00 41.81 C
 ATOM 12 CE LYS A 223 5.104 13.734 31.018 1.00 42.06 C
 ATOM 13 NZ LYS A 223 4.402 14.475 32.086 1.00 44.15 N
 ATOM 14 N GLN A 224 4.726 10.061 27.238 1.00 31.03 N
 ATOM 15 CA GLN A 224 5.498 8.914 27.724 1.00 28.05 C
 ATOM 16 C GLN A 224 6.380 8.269 26.645 1.00 24.92 C
 ATOM 17 O GLN A 224 7.529 7.940 26.906 1.00 23.61 O
 ATOM 18 CB GLN A 224 4.559 7.862 28.337 1.00 28.88 C
 ATOM 19 CG GLN A 224 5.277 6.760 29.122 1.00 30.50 C
 ATOM 20 CD GLN A 224 6.299 7.311 30.119 1.00 33.39 C
 ATOM 21 OE1 GLN A 224 6.002 8.223 30.901 1.00 34.47 O

Forb. Fig 3E

ATOM	22	NE2	GLN	A	224	7.508	6.756	30.095	1.00	31.65	N
ATOM	23	N	ALA	A	225	5.850	8.099	25.436	1.00	23.38	N
ATOM	24	CA	ALA	A	225	6.628	7.477	24.353	1.00	22.17	C
ATOM	25	C	ALA	A	225	7.950	8.198	24.111	1.00	21.18	C
ATOM	26	O	ALA	A	225	8.984	7.573	23.866	1.00	20.40	O
ATOM	27	CB	ALA	A	225	5.815	7.444	23.072	1.00	20.93	C
ATOM	28	N	LEU	A	226	7.928	9.523	24.166	1.00	21.57	N
ATOM	29	CA	LEU	A	226	9.157	10.268	23.937	1.00	20.61	C
ATOM	30	C	LEU	A	226	10.130	10.029	25.088	1.00	20.17	C
ATOM	31	O	LEU	A	226	11.333	9.983	24.879	1.00	18.07	O
ATOM	32	CB	LEU	A	226	8.849	11.759	23.751	1.00	23.24	C
ATOM	33	CG	LEU	A	226	8.151	12.024	22.405	1.00	25.31	C
ATOM	34	CD1	LEU	A	226	7.561	13.427	22.358	1.00	26.56	C
ATOM	35	CD2	LEU	A	226	9.147	11.815	21.272	1.00	27.28	C
ATOM	36	N	LYS	A	227	9.608	9.875	26.302	1.00	18.41	N
ATOM	37	CA	LYS	A	227	10.466	9.592	27.455	1.00	18.52	C
ATOM	38	C	LYS	A	227	11.112	8.217	27.278	1.00	16.86	C
ATOM	39	O	LYS	A	227	12.282	8.026	27.595	1.00	15.00	O
ATOM	40	CB	LYS	A	227	9.645	9.597	28.743	1.00	20.21	C
ATOM	41	CG	LYS	A	227	9.123	10.974	29.124	1.00	25.22	C
ATOM	42	CD	LYS	A	227	9.988	11.642	30.191	1.00	27.59	C
ATOM	43	CE	LYS	A	227	9.672	11.080	31.579	1.00	29.87	C
ATOM	44	NZ	LYS	A	227	10.312	11.824	32.710	1.00	29.96	N
ATOM	45	N	GLU	A	228	10.333	7.253	26.802	1.00	14.66	N
ATOM	46	CA	GLU	A	228	10.873	5.913	26.570	1.00	15.15	C
ATOM	47	C	GLU	A	228	11.945	5.982	25.464	1.00	13.46	C
ATOM	48	O	GLU	A	228	13.004	5.369	25.580	1.00	11.83	O
ATOM	49	CB	GLU	A	228	9.762	4.949	26.134	1.00	15.30	C
ATOM	50	CG	GLU	A	228	8.654	4.757	27.172	1.00	17.47	C
ATOM	51	CD	GLU	A	228	9.058	3.883	28.353	1.00	20.49	C
ATOM	52	OE1	GLU	A	228	8.376	3.966	29.398	1.00	20.67	O
ATOM	53	OE2	GLU	A	228	10.034	3.112	28.242	1.00	19.22	O
ATOM	54	N	LYS	A	229	11.663	6.718	24.391	1.00	10.86	N
ATOM	55	CA	LYS	A	229	12.633	6.826	23.304	1.00	12.81	C
ATOM	56	C	LYS	A	229	13.960	7.399	23.789	1.00	12.38	C
ATOM	57	O	LYS	A	229	15.029	6.910	23.418	1.00	11.31	O
ATOM	58	CB	LYS	A	229	12.097	7.709	22.183	1.00	13.09	C
ATOM	59	CG	LYS	A	229	13.032	7.792	20.999	1.00	14.61	C
ATOM	60	CD	LYS	A	229	12.751	9.001	20.140	1.00	16.56	C
ATOM	61	CE	LYS	A	229	12.949	10.277	20.920	1.00	18.31	C
ATOM	62	NZ	LYS	A	229	13.043	11.414	19.985	1.00	21.48	N
ATOM	63	N	GLU	A	230	13.897	8.437	24.621	1.00	12.71	N
ATOM	64	CA	GLU	A	230	15.124	9.053	25.113	1.00	13.54	C
ATOM	65	C	GLU	A	230	15.942	8.142	26.024	1.00	13.04	C
ATOM	66	O	GLU	A	230	17.179	8.182	26.010	1.00	12.44	O
ATOM	67	CB	GLU	A	230	14.810	10.374	25.826	1.00	16.75	C
ATOM	68	CG	GLU	A	230	14.571	11.535	24.865	1.00	20.67	C
ATOM	69	CD	GLU	A	230	15.596	11.592	23.706	1.00	23.49	C
ATOM	70	OE1	GLU	A	230	16.823	11.446	23.930	1.00	23.86	O
ATOM	71	OE2	GLU	A	230	15.159	11.800	22.555	1.00	27.03	O
ATOM	72	N	LEU	A	231	15.263	7.339	26.837	1.00	10.97	N
ATOM	73	CA	LEU	A	231	15.998	6.416	27.694	1.00	11.77	C
ATOM	74	C	LEU	A	231	16.657	5.389	26.785	1.00	10.32	C
ATOM	75	O	LEU	A	231	17.743	4.895	27.080	1.00	10.48	O
ATOM	76	CB	LEU	A	231	15.059	5.717	28.687	1.00	13.00	C
ATOM	77	CG	LEU	A	231	14.561	6.627	29.821	1.00	13.84	C
ATOM	78	CD1	LEU	A	231	13.542	5.872	30.695	1.00	15.02	C
ATOM	79	CD2	LEU	A	231	15.764	7.086	30.656	1.00	11.38	C
ATOM	80	N	GLY	A	232	15.996	5.068	25.677	1.00	10.29	N

Forb. Fig 3 E

ATOM	81	CA	GLY A 232	16.577	4.123	24.734	1.00	10.05	C
ATOM	82	C	GLY A 232	17.802	4.725	24.052	1.00	10.94	C
ATOM	83	O	GLY A 232	18.843	4.066	23.910	1.00	9.27	O
ATOM	84	N	ASN A 233	17.687	5.986	23.632	1.00	11.09	N
ATOM	85	CA	ASN A 233	18.795	6.659	22.950	1.00	12.60	C
ATOM	86	C	ASN A 233	20.030	6.715	23.842	1.00	13.14	C
ATOM	87	O	ASN A 233	21.136	6.453	23.376	1.00	10.89	O
ATOM	88	CB	ASN A 233	18.415	8.095	22.525	1.00	12.35	C
ATOM	89	CG	ASN A 233	17.365	8.136	21.410	1.00	14.23	C
ATOM	90	OD1	ASN A 233	17.135	7.148	20.709	1.00	13.22	O
ATOM	91	ND2	ASN A 233	16.738	9.303	21.230	1.00	13.95	N
ATOM	92	N	ASP A 234	19.832	7.069	25.111	1.00	13.19	N
ATOM	93	CA	ASP A 234	20.931	7.159	26.085	1.00	15.71	C
ATOM	94	C	ASP A 234	21.619	5.797	26.183	1.00	14.90	C
ATOM	95	O	ASP A 234	22.850	5.703	26.193	1.00	16.24	O
ATOM	96	CB	ASP A 234	20.396	7.557	27.477	1.00	19.45	C
ATOM	97	CG	ASP A 234	19.814	8.980	27.528	1.00	24.77	C
ATOM	98	OD1	ASP A 234	18.905	9.236	28.375	1.00	24.99	O
ATOM	99	OD2	ASP A 234	20.262	9.850	26.745	1.00	27.20	O
ATOM	100	N	ALA A 235	20.827	4.725	26.221	1.00	14.59	N
ATOM	101	CA	ALA A 235	21.399	3.380	26.326	1.00	13.28	C
ATOM	102	C	ALA A 235	22.162	2.988	25.062	1.00	13.68	C
ATOM	103	O	ALA A 235	23.265	2.438	25.134	1.00	14.70	O
ATOM	104	CB	ALA A 235	20.300	2.352	26.620	1.00	12.82	C
ATOM	105	N	TYR A 236	21.555	3.253	23.907	1.00	13.89	N
ATOM	106	CA	TYR A 236	22.166	2.976	22.612	1.00	12.66	C
ATOM	107	C	TYR A 236	23.577	3.598	22.528	1.00	14.89	C
ATOM	108	O	TYR A 236	24.538	2.958	22.102	1.00	15.49	O
ATOM	109	CB	TYR A 236	21.302	3.579	21.503	1.00	11.72	C
ATOM	110	CG	TYR A 236	21.985	3.631	20.150	1.00	11.52	C
ATOM	111	CD1	TYR A 236	22.114	2.480	19.368	1.00	11.02	C
ATOM	112	CD2	TYR A 236	22.491	4.835	19.646	1.00	9.76	C
ATOM	113	CE1	TYR A 236	22.721	2.526	18.116	1.00	11.39	C
ATOM	114	CE2	TYR A 236	23.112	4.889	18.387	1.00	9.91	C
ATOM	115	CZ	TYR A 236	23.215	3.729	17.630	1.00	10.34	C
ATOM	116	OH	TYR A 236	23.762	3.770	16.366	1.00	9.87	O
ATOM	117	N	LYS A 237	23.687	4.853	22.927	1.00	15.04	N
ATOM	118	CA	LYS A 237	24.970	5.543	22.860	1.00	19.91	C
ATOM	119	C	LYS A 237	26.075	4.928	23.712	1.00	21.07	C
ATOM	120	O	LYS A 237	27.261	5.080	23.395	1.00	21.79	O
ATOM	121	CB	LYS A 237	24.772	7.017	23.199	1.00	21.22	C
ATOM	122	CG	LYS A 237	24.001	7.754	22.119	1.00	22.64	C
ATOM	123	CD	LYS A 237	23.696	9.182	22.506	1.00	27.24	C
ATOM	124	CE	LYS A 237	22.792	9.829	21.461	1.00	28.99	C
ATOM	125	NZ	LYS A 237	22.200	11.111	21.942	1.00	31.56	N
ATOM	126	N	LYS A 238	25.703	4.222	24.775	1.00	21.48	N
ATOM	127	CA	LYS A 238	26.695	3.577	25.642	1.00	22.12	C
ATOM	128	C	LYS A 238	26.887	2.138	25.197	1.00	21.06	C
ATOM	129	O	LYS A 238	27.536	1.348	25.875	1.00	21.99	O
ATOM	130	CB	LYS A 238	26.227	3.581	27.099	1.00	25.20	C
ATOM	131	CG	LYS A 238	25.844	4.941	27.631	1.00	28.10	C
ATOM	132	CD	LYS A 238	27.001	5.898	27.578	1.00	29.87	C
ATOM	133	CE	LYS A 238	26.562	7.306	27.912	1.00	32.55	C
ATOM	134	NZ	LYS A 238	27.698	8.265	27.754	1.00	33.19	N
ATOM	135	N	LYS A 239	26.309	1.803	24.052	1.00	19.28	N
ATOM	136	CA	LYS A 239	26.395	0.465	23.507	1.00	18.66	C
ATOM	137	C	LYS A 239	25.616	-0.565	24.328	1.00	17.21	C
ATOM	138	O	LYS A 239	25.886	-1.760	24.269	1.00	15.56	O
ATOM	139	CB	LYS A 239	27.869	0.059	23.344	1.00	22.63	C

Forb. Fig. 3E

ATOM	140	CG	LYS	A	239	28.607	0.996	22.391	1.00	23.76	C
ATOM	141	CD	LYS	A	239	30.107	0.760	22.353	1.00	26.21	C
ATOM	142	CE	LYS	A	239	30.707	1.469	21.148	1.00	28.30	C
ATOM	143	NZ	LYS	A	239	30.272	2.898	21.065	1.00	30.49	N
ATOM	144	N	ASP	A	240	24.633	-0.092	25.088	1.00	15.85	N
ATOM	145	CA	ASP	A	240	23.772	-0.998	25.859	1.00	14.22	C
ATOM	146	C	ASP	A	240	22.579	-1.225	24.944	1.00	12.87	C
ATOM	147	O	ASP	A	240	21.525	-0.607	25.096	1.00	11.11	O
ATOM	148	CB	ASP	A	240	23.316	-0.357	27.177	1.00	13.15	C
ATOM	149	CG	ASP	A	240	22.416	-1.280	27.986	1.00	15.24	C
ATOM	150	OD1	ASP	A	240	22.098	-2.382	27.487	1.00	15.21	O
ATOM	151	OD2	ASP	A	240	22.024	-0.913	29.116	1.00	13.86	O
ATOM	152	N	PHE	A	241	22.764	-2.121	23.976	1.00	13.59	N
ATOM	153	CA	PHE	A	241	21.748	-2.420	22.975	1.00	13.71	C
ATOM	154	C	PHE	A	241	20.495	-3.154	23.433	1.00	13.76	C
ATOM	155	O	PHE	A	241	19.410	-2.944	22.879	1.00	12.87	O
ATOM	156	CB	PHE	A	241	22.416	-3.169	21.819	1.00	13.79	C
ATOM	157	CG	PHE	A	241	23.557	-2.413	21.204	1.00	13.70	C
ATOM	158	CD1	PHE	A	241	24.772	-3.041	20.941	1.00	16.65	C
ATOM	159	CD2	PHE	A	241	23.423	-1.068	20.890	1.00	14.68	C
ATOM	160	CE1	PHE	A	241	25.827	-2.332	20.374	1.00	15.77	C
ATOM	161	CE2	PHE	A	241	24.475	-0.357	20.326	1.00	16.11	C
ATOM	162	CZ	PHE	A	241	25.681	-0.996	20.068	1.00	16.68	C
ATOM	163	N	ASP	A	242	20.620	-4.034	24.416	1.00	14.20	N
ATOM	164	CA	ASP	A	242	19.426	-4.720	24.874	1.00	16.69	C
ATOM	165	C	ASP	A	242	18.469	-3.706	25.503	1.00	15.06	C
ATOM	166	O	ASP	A	242	17.269	-3.728	25.250	1.00	11.61	O
ATOM	167	CB	ASP	A	242	19.764	-5.781	25.914	1.00	20.90	C
ATOM	168	CG	ASP	A	242	18.535	-6.454	26.442	1.00	26.65	C
ATOM	169	OD1	ASP	A	242	17.868	-7.170	25.654	1.00	30.89	O
ATOM	170	OD2	ASP	A	242	18.214	-6.257	27.635	1.00	30.33	O
ATOM	171	N	THR	A	243	19.012	-2.834	26.347	1.00	14.66	N
ATOM	172	CA	THR	A	243	18.200	-1.818	27.011	1.00	12.61	C
ATOM	173	C	THR	A	243	17.554	-0.914	25.964	1.00	10.67	C
ATOM	174	O	THR	A	243	16.362	-0.633	26.024	1.00	9.58	O
ATOM	175	CB	THR	A	243	19.067	-0.958	27.971	1.00	14.37	C
ATOM	176	OG1	THR	A	243	19.491	-1.762	29.082	1.00	16.41	O
ATOM	177	CG2	THR	A	243	18.287	0.236	28.487	1.00	12.50	C
ATOM	178	N	ALA	A	244	18.346	-0.459	25.001	1.00	10.88	N
ATOM	179	CA	ALA	A	244	17.828	0.404	23.944	1.00	10.38	C
ATOM	180	C	ALA	A	244	16.639	-0.245	23.223	1.00	10.61	C
ATOM	181	O	ALA	A	244	15.607	0.387	23.043	1.00	9.79	O
ATOM	182	CB	ALA	A	244	18.940	0.733	22.936	1.00	10.36	C
ATOM	183	N	LEU	A	245	16.772	-1.503	22.809	1.00	10.96	N
ATOM	184	CA	LEU	A	245	15.669	-2.151	22.099	1.00	10.68	C
ATOM	185	C	LEU	A	245	14.408	-2.246	22.939	1.00	10.65	C
ATOM	186	O	LEU	A	245	13.313	-1.995	22.451	1.00	9.54	O
ATOM	187	CB	LEU	A	245	16.068	-3.550	21.622	1.00	12.39	C
ATOM	188	CG	LEU	A	245	17.128	-3.579	20.510	1.00	11.54	C
ATOM	189	CD1	LEU	A	245	17.594	-5.016	20.296	1.00	13.20	C
ATOM	190	CD2	LEU	A	245	16.565	-2.981	19.238	1.00	13.02	C
ATOM	191	N	LYS	A	246	14.553	-2.596	24.211	1.00	11.67	N
ATOM	192	CA	LYS	A	246	13.381	-2.706	25.074	1.00	11.96	C
ATOM	193	C	LYS	A	246	12.635	-1.383	25.242	1.00	12.20	C
ATOM	194	O	LYS	A	246	11.394	-1.346	25.232	1.00	11.78	O
ATOM	195	CB	LYS	A	246	13.799	-3.290	26.426	1.00	13.42	C
ATOM	196	CG	LYS	A	246	14.128	-4.787	26.311	1.00	15.71	C
ATOM	197	CD	LYS	A	246	14.710	-5.336	27.601	1.00	18.91	C
ATOM	198	CE	LYS	A	246	15.158	-6.794	27.431	1.00	20.65	C

Forsk. Fig 3E

ATOM	199	NZ	LYS A 246	13.999	-7.689	27.185	1.00	23.41	N
ATOM	200	N	HIS A 247	13.367	-0.282	25.380	1.00	11.41	N
ATOM	201	CA	HIS A 247	12.677	1.001	25.507	1.00	9.71	C
ATOM	202	C	HIS A 247	12.094	1.474	24.183	1.00	9.70	C
ATOM	203	O	HIS A 247	11.021	2.104	24.161	1.00	9.95	O
ATOM	204	CB	HIS A 247	13.599	2.040	26.126	1.00	10.49	C
ATOM	205	CG	HIS A 247	13.601	1.987	27.615	1.00	8.52	C
ATOM	206	ND1	HIS A 247	12.589	2.539	28.373	1.00	10.29	N
ATOM	207	CD2	HIS A 247	14.449	1.405	28.488	1.00	10.21	C
ATOM	208	CE1	HIS A 247	12.819	2.305	29.650	1.00	8.27	C
ATOM	209	NE2	HIS A 247	13.940	1.619	29.747	1.00	11.09	N
ATOM	210	N	TYR A 248	12.760	1.157	23.075	1.00	8.36	N
ATOM	211	CA	TYR A 248	12.197	1.544	21.782	1.00	10.17	C
ATOM	212	C	TYR A 248	10.923	0.726	21.552	1.00	10.48	C
ATOM	213	O	TYR A 248	9.978	1.206	20.914	1.00	10.39	O
ATOM	214	CB	TYR A 248	13.171	1.278	20.634	1.00	8.99	C
ATOM	215	CG	TYR A 248	14.383	2.165	20.621	1.00	8.42	C
ATOM	216	CD1	TYR A 248	15.595	1.693	20.133	1.00	9.38	C
ATOM	217	CD2	TYR A 248	14.321	3.484	21.074	1.00	9.32	C
ATOM	218	CE1	TYR A 248	16.719	2.510	20.085	1.00	8.69	C
ATOM	219	CE2	TYR A 248	15.451	4.314	21.039	1.00	8.99	C
ATOM	220	CZ	TYR A 248	16.642	3.811	20.538	1.00	8.77	C
ATOM	221	OH	TYR A 248	17.771	4.608	20.494	1.00	9.95	O
ATOM	222	N	ASP A 249	10.917	-0.521	22.022	1.00	12.13	N
ATOM	223	CA	ASP A 249	9.727	-1.373	21.892	1.00	14.28	C
ATOM	224	C	ASP A 249	8.548	-0.733	22.633	1.00	14.47	C
ATOM	225	O	ASP A 249	7.418	-0.705	22.123	1.00	14.33	O
ATOM	226	CB	ASP A 249	9.976	-2.784	22.465	1.00	15.11	C
ATOM	227	CG	ASP A 249	10.624	-3.739	21.453	1.00	17.26	C
ATOM	228	OD1	ASP A 249	10.632	-3.451	20.244	1.00	18.60	O
ATOM	229	OD2	ASP A 249	11.108	-4.804	21.868	1.00	19.44	O
ATOM	230	N	LYS A 250	8.796	-0.214	23.832	1.00	15.03	N
ATOM	231	CA	LYS A 250	7.710	0.421	24.589	1.00	16.47	C
ATOM	232	C	LYS A 250	7.242	1.707	23.905	1.00	15.64	C
ATOM	233	O	LYS A 250	6.059	2.041	23.933	1.00	15.19	O
ATOM	234	CB	LYS A 250	8.127	0.751	26.028	1.00	17.72	C
ATOM	235	CG	LYS A 250	6.962	1.317	26.841	1.00	21.60	C
ATOM	236	CD	LYS A 250	5.711	0.431	26.672	1.00	24.48	C
ATOM	237	CE	LYS A 250	4.448	1.110	27.152	1.00	26.00	C
ATOM	238	NZ	LYS A 250	4.479	1.348	28.621	1.00	29.12	N
ATOM	239	N	ALA A 251	8.170	2.433	23.294	1.00	14.98	N
ATOM	240	CA	ALA A 251	7.795	3.652	22.598	1.00	14.73	C
ATOM	241	C	ALA A 251	6.913	3.310	21.395	1.00	15.78	C
ATOM	242	O	ALA A 251	5.911	3.996	21.146	1.00	16.16	O
ATOM	243	CB	ALA A 251	9.048	4.421	22.154	1.00	14.48	C
ATOM	244	N	LYS A 252	7.260	2.245	20.666	1.00	15.89	N
ATOM	245	CA	LYS A 252	6.472	1.822	19.491	1.00	18.51	C
ATOM	246	C	LYS A 252	5.082	1.353	19.892	1.00	19.54	C
ATOM	247	O	LYS A 252	4.103	1.570	19.174	1.00	19.43	O
ATOM	248	CB	LYS A 252	7.130	0.660	18.744	1.00	19.23	C
ATOM	249	CG	LYS A 252	8.336	1.020	17.920	1.00	23.76	C
ATOM	250	CD	LYS A 252	8.624	-0.059	16.872	1.00	25.61	C
ATOM	251	CE	LYS A 252	8.978	-1.397	17.503	1.00	25.70	C
ATOM	252	NZ	LYS A 252	9.412	-2.368	16.454	1.00	23.62	N
ATOM	253	N	GLU A 253	5.010	0.677	21.031	1.00	20.07	N
ATOM	254	CA	GLU A 253	3.745	0.183	21.538	1.00	20.75	C
ATOM	255	C	GLU A 253	2.807	1.367	21.796	1.00	20.42	C
ATOM	256	O	GLU A 253	1.621	1.300	21.508	1.00	20.12	O
ATOM	257	CB	GLU A 253	3.991	-0.596	22.829	1.00	23.44	C

Forb. Fig 3E

ATOM	258	CG	GLU	A	253	2.753	-1.207	23.457	1.00	27.71	C
ATOM	259	CD	GLU	A	253	2.999	-1.607	24.897	1.00	29.61	C
ATOM	260	OE1	GLU	A	253	3.907	-2.431	25.134	1.00	30.62	O
ATOM	261	OE2	GLU	A	253	2.295	-1.083	25.791	1.00	32.53	O
ATOM	262	N	LEU	A	254	3.351	2.455	22.332	1.00	20.02	N
ATOM	263	CA	LEU	A	254	2.568	3.652	22.646	1.00	19.24	C
ATOM	264	C	LEU	A	254	2.272	4.585	21.472	1.00	19.84	C
ATOM	265	O	LEU	A	254	1.237	5.254	21.454	1.00	19.28	O
ATOM	266	CB	LEU	A	254	3.289	4.472	23.718	1.00	19.19	C
ATOM	267	CG	LEU	A	254	3.456	3.859	25.108	1.00	18.05	C
ATOM	268	CD1	LEU	A	254	4.517	4.619	25.867	1.00	20.04	C
ATOM	269	CD2	LEU	A	254	2.123	3.903	25.853	1.00	20.12	C
ATOM	270	N	ASP	A	255	3.173	4.619	20.493	1.00	18.88	N
ATOM	271	CA	ASP	A	255	3.053	5.527	19.349	1.00	19.61	C
ATOM	272	C	ASP	A	255	3.428	4.751	18.085	1.00	18.93	C
ATOM	273	O	ASP	A	255	4.451	5.019	17.461	1.00	18.73	O
ATOM	274	CB	ASP	A	255	4.027	6.690	19.607	1.00	20.32	C
ATOM	275	CG	ASP	A	255	3.894	7.831	18.621	1.00	22.76	C
ATOM	276	OD1	ASP	A	255	2.911	7.873	17.869	1.00	22.87	O
ATOM	277	OD2	ASP	A	255	4.796	8.708	18.624	1.00	24.30	O
ATOM	278	N	PRO	A	256	2.581	3.792	17.678	1.00	18.05	N
ATOM	279	CA	PRO	A	256	2.830	2.965	16.496	1.00	17.12	C
ATOM	280	C	PRO	A	256	2.920	3.617	15.110	1.00	17.27	C
ATOM	281	O	PRO	A	256	3.330	2.969	14.157	1.00	16.27	O
ATOM	282	CB	PRO	A	256	1.732	1.907	16.582	1.00	18.37	C
ATOM	283	CG	PRO	A	256	0.603	2.624	17.249	1.00	18.61	C
ATOM	284	CD	PRO	A	256	1.287	3.453	18.309	1.00	18.53	C
ATOM	285	N	THR	A	257	2.541	4.883	14.983	1.00	16.22	N
ATOM	286	CA	THR	A	257	2.626	5.536	13.680	1.00	16.54	C
ATOM	287	C	THR	A	257	3.905	6.377	13.547	1.00	17.15	C
ATOM	288	O	THR	A	257	4.091	7.062	12.537	1.00	16.71	O
ATOM	289	CB	THR	A	257	1.424	6.465	13.439	1.00	16.72	C
ATOM	290	OG1	THR	A	257	1.434	7.505	14.421	1.00	16.92	O
ATOM	291	CG2	THR	A	257	0.117	5.688	13.537	1.00	17.27	C
ATOM	292	N	ASN	A	258	4.773	6.320	14.557	1.00	15.93	N
ATOM	293	CA	ASN	A	258	6.019	7.099	14.558	1.00	17.57	C
ATOM	294	C	ASN	A	258	7.156	6.248	14.006	1.00	16.65	C
ATOM	295	O	ASN	A	258	7.627	5.331	14.676	1.00	15.85	O
ATOM	296	CB	ASN	A	258	6.366	7.547	15.983	1.00	19.29	C
ATOM	297	CG	ASN	A	258	7.512	8.552	16.022	1.00	22.26	C
ATOM	298	OD1	ASN	A	258	8.510	8.407	15.311	1.00	23.22	O
ATOM	299	ND2	ASN	A	258	7.376	9.570	16.863	1.00	22.91	N
ATOM	300	N	MET	A	259	7.626	6.569	12.804	1.00	15.07	N
ATOM	301	CA	MET	A	259	8.680	5.762	12.195	1.00	14.81	C
ATOM	302	C	MET	A	259	10.058	5.927	12.836	1.00	14.33	C
ATOM	303	O	MET	A	259	10.940	5.093	12.628	1.00	13.68	O
ATOM	304	CB	MET	A	259	8.752	6.034	10.681	1.00	16.06	C
ATOM	305	CG	MET	A	259	9.401	7.350	10.269	1.00	17.61	C
ATOM	306	SD	MET	A	259	9.388	7.515	8.440	1.00	18.47	S
ATOM	307	CE	MET	A	259	10.758	6.488	7.955	1.00	17.96	C
ATOM	308	N	THR	A	260	10.242	6.978	13.635	1.00	13.04	N
ATOM	309	CA	THR	A	260	11.530	7.203	14.285	1.00	13.61	C
ATOM	310	C	THR	A	260	11.952	6.081	15.251	1.00	11.92	C
ATOM	311	O	THR	A	260	13.122	5.739	15.311	1.00	10.39	O
ATOM	312	CB	THR	A	260	11.553	8.546	15.054	1.00	14.84	C
ATOM	313	OG1	THR	A	260	11.352	9.625	14.136	1.00	19.41	O
ATOM	314	CG2	THR	A	260	12.896	8.746	15.736	1.00	16.40	C
ATOM	315	N	TYR	A	261	11.018	5.499	16.002	1.00	11.57	N
ATOM	316	CA	TYR	A	261	11.400	4.423	16.935	1.00	11.12	C

Forb. Fig 3E

ATOM	317	C	TYR A 261	11.889	3.193	16.172	1.00	10.73	C
ATOM	318	O	TYR A 261	12.739	2.441	16.661	1.00	8.66	O
ATOM	319	CB	TYR A 261	10.214	4.001	17.810	1.00	12.66	C
ATOM	320	CG	TYR A 261	9.493	5.154	18.435	1.00	14.27	C
ATOM	321	CD1	TYR A 261	8.103	5.180	18.492	1.00	16.00	C
ATOM	322	CD2	TYR A 261	10.202	6.233	18.970	1.00	16.45	C
ATOM	323	CE1	TYR A 261	7.434	6.250	19.066	1.00	18.04	C
ATOM	324	CE2	TYR A 261	9.547	7.299	19.544	1.00	16.91	C
ATOM	325	CZ	TYR A 261	8.163	7.305	19.591	1.00	17.47	C
ATOM	326	OH	TYR A 261	7.521	8.375	20.170	1.00	19.98	O
ATOM	327	N	ILE A 262	11.319	2.985	14.991	1.00	10.62	N
ATOM	328	CA	ILE A 262	11.683	1.858	14.135	1.00	9.74	C
ATOM	329	C	ILE A 262	13.068	2.110	13.520	1.00	9.62	C
ATOM	330	O	ILE A 262	13.929	1.218	13.534	1.00	10.05	O
ATOM	331	CB	ILE A 262	10.661	1.694	12.995	1.00	10.63	C
ATOM	332	CG1	ILE A 262	9.262	1.519	13.589	1.00	12.48	C
ATOM	333	CG2	ILE A 262	11.054	0.514	12.089	1.00	9.57	C
ATOM	334	CD1	ILE A 262	8.165	1.519	12.557	1.00	14.22	C
ATOM	335	N	THR A 263	13.296	3.307	12.979	1.00	8.73	N
ATOM	336	CA	THR A 263	14.613	3.577	12.410	1.00	9.20	C
ATOM	337	C	THR A 263	15.676	3.529	13.514	1.00	8.56	C
ATOM	338	O	THR A 263	16.833	3.164	13.252	1.00	9.57	O
ATOM	339	CB	THR A 263	14.679	4.948	11.655	1.00	11.83	C
ATOM	340	OG1	THR A 263	14.327	6.032	12.534	1.00	11.16	O
ATOM	341	CG2	THR A 263	13.727	4.924	10.462	1.00	11.59	C
ATOM	342	N	ASN A 264	15.295	3.894	14.741	1.00	9.13	N
ATOM	343	CA	ASN A 264	16.236	3.846	15.872	1.00	9.21	C
ATOM	344	C	ASN A 264	16.583	2.387	16.168	1.00	9.78	C
ATOM	345	O	ASN A 264	17.737	2.062	16.474	1.00	8.96	O
ATOM	346	CB	ASN A 264	15.638	4.510	17.130	1.00	9.57	C
ATOM	347	CG	ASN A 264	15.782	6.026	17.122	1.00	11.01	C
ATOM	348	OD1	ASN A 264	16.293	6.608	16.157	1.00	10.76	O
ATOM	349	ND2	ASN A 264	15.343	6.678	18.212	1.00	8.53	N
ATOM	350	N	GLN A 265	15.591	1.497	16.109	1.00	10.36	N
ATOM	351	CA	GLN A 265	15.889	0.085	16.338	1.00	10.99	C
ATOM	352	C	GLN A 265	16.802	-0.423	15.223	1.00	11.02	C
ATOM	353	O	GLN A 265	17.641	-1.293	15.453	1.00	9.38	O
ATOM	354	CB	GLN A 265	14.612	-0.745	16.358	1.00	13.55	C
ATOM	355	CG	GLN A 265	13.750	-0.448	17.558	1.00	15.34	C
ATOM	356	CD	GLN A 265	12.705	-1.493	17.765	1.00	18.92	C
ATOM	357	OE1	GLN A 265	11.922	-1.781	16.858	1.00	19.62	O
ATOM	358	NE2	GLN A 265	12.672	-2.076	18.966	1.00	19.17	N
ATOM	359	N	ALA A 266	16.631	0.127	14.020	1.00	9.31	N
ATOM	360	CA	ALA A 266	17.466	-0.272	12.878	1.00	10.21	C
ATOM	361	C	ALA A 266	18.930	0.092	13.170	1.00	10.07	C
ATOM	362	O	ALA A 266	19.856	-0.629	12.793	1.00	8.92	O
ATOM	363	CB	ALA A 266	16.990	0.438	11.615	1.00	9.02	C
ATOM	364	N	ALA A 267	19.127	1.218	13.850	1.00	9.32	N
ATOM	365	CA	ALA A 267	20.470	1.668	14.191	1.00	10.16	C
ATOM	366	C	ALA A 267	21.092	0.692	15.167	1.00	9.86	C
ATOM	367	O	ALA A 267	22.274	0.378	15.073	1.00	10.35	O
ATOM	368	CB	ALA A 267	20.427	3.089	14.801	1.00	10.25	C
ATOM	369	N	VAL A 268	20.294	0.201	16.105	1.00	10.71	N
ATOM	370	CA	VAL A 268	20.808	-0.759	17.077	1.00	11.30	C
ATOM	371	C	VAL A 268	21.295	-2.030	16.366	1.00	10.52	C
ATOM	372	O	VAL A 268	22.404	-2.489	16.617	1.00	10.52	O
ATOM	373	CB	VAL A 268	19.732	-1.139	18.119	1.00	11.25	C
ATOM	374	CG1	VAL A 268	20.259	-2.258	19.019	1.00	9.91	C
ATOM	375	CG2	VAL A 268	19.386	0.099	18.961	1.00	9.61	C

Form. Fig 3E

ATOM	376	N	TYR A 269	20.475	-2.600	15.485	1.00	9.84	N
ATOM	377	CA	TYR A 269	20.916	-3.802	14.785	1.00	10.71	C
ATOM	378	C	TYR A 269	22.116	-3.526	13.899	1.00	10.82	C
ATOM	379	O	TYR A 269	23.011	-4.361	13.770	1.00	10.80	O
ATOM	380	CB	TYR A 269	19.767	-4.427	13.983	1.00	11.10	C
ATOM	381	CG	TYR A 269	18.794	-5.140	14.883	1.00	12.32	C
ATOM	382	CD1	TYR A 269	17.616	-4.530	15.306	1.00	14.00	C
ATOM	383	CD2	TYR A 269	19.082	-6.416	15.370	1.00	15.11	C
ATOM	384	CE1	TYR A 269	16.752	-5.174	16.198	1.00	13.55	C
ATOM	385	CE2	TYR A 269	18.226	-7.059	16.258	1.00	14.69	C
ATOM	386	CZ	TYR A 269	17.070	-6.434	16.668	1.00	14.70	C
ATOM	387	OH	TYR A 269	16.243	-7.065	17.569	1.00	16.56	O
ATOM	388	N	PHE A 270	22.149	-2.349	13.287	1.00	11.01	N
ATOM	389	CA	PHE A 270	23.301	-1.989	12.462	1.00	12.81	C
ATOM	390	C	PHE A 270	24.576	-2.098	13.320	1.00	13.37	C
ATOM	391	O	PHE A 270	25.580	-2.702	12.901	1.00	13.18	O
ATOM	392	CB	PHE A 270	23.144	-0.541	11.967	1.00	13.59	C
ATOM	393	CG	PHE A 270	24.282	-0.059	11.110	1.00	14.22	C
ATOM	394	CD1	PHE A 270	24.128	0.038	9.732	1.00	14.86	C
ATOM	395	CD2	PHE A 270	25.492	0.318	11.681	1.00	13.34	C
ATOM	396	CE1	PHE A 270	25.169	0.509	8.933	1.00	16.98	C
ATOM	397	CE2	PHE A 270	26.539	0.792	10.900	1.00	15.12	C
ATOM	398	CZ	PHE A 270	26.379	0.889	9.523	1.00	15.38	C
ATOM	399	N	GLU A 271	24.532	-1.507	14.516	1.00	12.93	N
ATOM	400	CA	GLU A 271	25.692	-1.500	15.412	1.00	14.90	C
ATOM	401	C	GLU A 271	26.011	-2.870	16.014	1.00	15.09	C
ATOM	402	O	GLU A 271	27.124	-3.106	16.473	1.00	14.60	O
ATOM	403	CB	GLU A 271	25.523	-0.441	16.512	1.00	14.98	C
ATOM	404	CG	GLU A 271	25.492	1.022	16.003	1.00	15.65	C
ATOM	405	CD	GLU A 271	26.769	1.456	15.294	1.00	18.14	C
ATOM	406	OE1	GLU A 271	27.859	1.029	15.711	1.00	16.76	O
ATOM	407	OE2	GLU A 271	26.693	2.247	14.326	1.00	17.41	O
ATOM	408	N	LYS A 272	25.041	-3.773	16.012	1.00	14.84	N
ATOM	409	CA	LYS A 272	25.295	-5.130	16.490	1.00	15.51	C
ATOM	410	C	LYS A 272	25.883	-5.929	15.311	1.00	16.45	C
ATOM	411	O	LYS A 272	26.305	-7.067	15.483	1.00	14.12	O
ATOM	412	CB	LYS A 272	24.001	-5.812	16.942	1.00	15.05	C
ATOM	413	CG	LYS A 272	23.417	-5.271	18.234	1.00	16.40	C
ATOM	414	CD	LYS A 272	22.091	-5.933	18.587	1.00	15.93	C
ATOM	415	CE	LYS A 272	22.265	-7.359	19.090	1.00	19.54	C
ATOM	416	NZ	LYS A 272	20.939	-7.947	19.460	1.00	18.94	N
ATOM	417	N	GLY A 273	25.880	-5.339	14.111	1.00	16.27	N
ATOM	418	CA	GLY A 273	26.405	-6.042	12.944	1.00	16.46	C
ATOM	419	C	GLY A 273	25.368	-6.860	12.188	1.00	16.77	C
ATOM	420	O	GLY A 273	25.702	-7.579	11.229	1.00	18.16	O
ATOM	421	N	ASP A 274	24.107	-6.765	12.606	1.00	15.44	N
ATOM	422	CA	ASP A 274	23.018	-7.498	11.966	1.00	15.36	C
ATOM	423	C	ASP A 274	22.443	-6.601	10.868	1.00	15.30	C
ATOM	424	O	ASP A 274	21.346	-6.068	11.005	1.00	13.97	O
ATOM	425	CB	ASP A 274	21.927	-7.811	12.990	1.00	17.15	C
ATOM	426	CG	ASP A 274	20.889	-8.808	12.475	1.00	18.52	C
ATOM	427	OD1	ASP A 274	20.730	-8.976	11.241	1.00	18.00	O
ATOM	428	OD2	ASP A 274	20.210	-9.418	13.329	1.00	19.04	O
ATOM	429	N	TYR A 275	23.200	-6.429	9.790	1.00	14.30	N
ATOM	430	CA	TYR A 275	22.768	-5.581	8.674	1.00	14.52	C
ATOM	431	C	TYR A 275	21.446	-5.988	8.043	1.00	14.27	C
ATOM	432	O	TYR A 275	20.651	-5.137	7.652	1.00	14.04	O
ATOM	433	CB	TYR A 275	23.870	-5.540	7.620	1.00	14.14	C
ATOM	434	CG	TYR A 275	25.155	-5.049	8.221	1.00	15.31	C

Forb. Fig 3E

ATOM	435	CD1	TYR A 275	26.306	-5.831	8.187	1.00	17.19	C
ATOM	436	CD2	TYR A 275	25.199	-3.826	8.906	1.00	14.09	C
ATOM	437	CE1	TYR A 275	27.471	-5.422	8.827	1.00	16.26	C
ATOM	438	CE2	TYR A 275	26.360	-3.405	9.552	1.00	12.94	C
ATOM	439	CZ	TYR A 275	27.487	-4.208	9.513	1.00	16.43	C
ATOM	440	OH	TYR A 275	28.621	-3.827	10.185	1.00	16.59	O
ATOM	441	N	ASN A 276	21.199	-7.287	7.930	1.00	14.90	N
ATOM	442	CA	ASN A 276	19.936	-7.712	7.357	1.00	15.02	C
ATOM	443	C	ASN A 276	18.740	-7.243	8.188	1.00	14.77	C
ATOM	444	O	ASN A 276	17.747	-6.773	7.642	1.00	13.73	O
ATOM	445	CB	ASN A 276	19.854	-9.230	7.238	1.00	15.48	C
ATOM	446	CG	ASN A 276	18.523	-9.679	6.670	1.00	17.88	C
ATOM	447	OD1	ASN A 276	18.202	-9.399	5.510	1.00	17.20	O
ATOM	448	ND2	ASN A 276	17.727	-10.364	7.489	1.00	22.05	N
ATOM	449	N	LYS A 277	18.811	-7.403	9.506	1.00	14.12	N
ATOM	450	CA	LYS A 277	17.689	-6.987	10.346	1.00	13.21	C
ATOM	451	C	LYS A 277	17.528	-5.471	10.273	1.00	12.74	C
ATOM	452	O	LYS A 277	16.410	-4.953	10.280	1.00	11.76	O
ATOM	453	CB	LYS A 277	17.909	-7.425	11.803	1.00	14.56	C
ATOM	454	CG	LYS A 277	16.745	-7.078	12.753	1.00	14.51	C
ATOM	455	CD	LYS A 277	15.436	-7.773	12.373	1.00	16.80	C
ATOM	456	CE	LYS A 277	14.317	-7.476	13.381	1.00	17.71	C
ATOM	457	NZ	LYS A 277	13.018	-8.157	13.039	1.00	19.61	N
ATOM	458	N	CYS A 278	18.651	-4.765	10.227	1.00	12.66	N
ATOM	459	CA	CYS A 278	18.619	-3.307	10.121	1.00	12.41	C
ATOM	460	C	CYS A 278	17.804	-2.930	8.875	1.00	12.48	C
ATOM	461	O	CYS A 278	16.885	-2.115	8.948	1.00	12.32	O
ATOM	462	CB	CYS A 278	20.047	-2.763	10.009	1.00	12.89	C
ATOM	463	SG	CYS A 278	20.179	-1.035	9.429	1.00	13.87	S
ATOM	464	N	ARG A 279	18.122	-3.538	7.735	1.00	12.45	N
ATOM	465	CA	ARG A 279	17.397	-3.225	6.499	1.00	12.24	C
ATOM	466	C	ARG A 279	15.923	-3.596	6.559	1.00	14.14	C
ATOM	467	O	ARG A 279	15.069	-2.887	6.016	1.00	12.89	O
ATOM	468	CB	ARG A 279	18.058	-3.909	5.302	1.00	13.20	C
ATOM	469	CG	ARG A 279	19.476	-3.449	5.038	1.00	9.43	C
ATOM	470	CD	ARG A 279	20.028	-4.074	3.734	1.00	11.01	C
ATOM	471	NE	ARG A 279	20.615	-5.407	3.919	1.00	12.18	N
ATOM	472	CZ	ARG A 279	21.920	-5.638	4.076	1.00	13.16	C
ATOM	473	NH1	ARG A 279	22.790	-4.635	4.077	1.00	11.48	N
ATOM	474	NH2	ARG A 279	22.366	-6.878	4.230	1.00	13.77	N
ATOM	475	N	GLU A 280	15.614	-4.708	7.212	1.00	14.21	N
ATOM	476	CA	GLU A 280	14.220	-5.126	7.354	1.00	14.52	C
ATOM	477	C	GLU A 280	13.448	-4.046	8.117	1.00	14.11	C
ATOM	478	O	GLU A 280	12.332	-3.671	7.743	1.00	13.43	O
ATOM	479	CB	GLU A 280	14.150	-6.434	8.141	1.00	16.42	C
ATOM	480	CG	GLU A 280	12.743	-6.888	8.412	1.00	19.32	C
ATOM	481	CD	GLU A 280	12.697	-7.924	9.496	1.00	21.26	C
ATOM	482	OE1	GLU A 280	13.347	-8.974	9.326	1.00	21.80	O
ATOM	483	OE2	GLU A 280	12.016	-7.680	10.517	1.00	23.97	O
ATOM	484	N	LEU A 281	14.052	-3.538	9.188	1.00	12.77	N
ATOM	485	CA	LEU A 281	13.412	-2.505	9.988	1.00	11.92	C
ATOM	486	C	LEU A 281	13.267	-1.199	9.220	1.00	10.91	C
ATOM	487	O	LEU A 281	12.235	-0.519	9.326	1.00	10.94	O
ATOM	488	CB	LEU A 281	14.201	-2.296	11.286	1.00	11.11	C
ATOM	489	CG	LEU A 281	14.017	-3.441	12.273	1.00	13.53	C
ATOM	490	CD1	LEU A 281	15.000	-3.322	13.435	1.00	14.65	C
ATOM	491	CD2	LEU A 281	12.569	-3.399	12.786	1.00	14.77	C
ATOM	492	N	CYS A 282	14.290	-0.840	8.449	1.00	10.18	N
ATOM	493	CA	CYS A 282	14.211	0.374	7.640	1.00	10.22	C

Forb. Fig 3E

ATOM	494	C	CYS A 282	13.053	0.262	6.647	1.00	11.35	C
ATOM	495	O	CYS A 282	12.297	1.212	6.470	1.00	11.23	O
ATOM	496	CB	CYS A 282	15.526	0.622	6.895	1.00	10.82	C
ATOM	497	SG	CYS A 282	16.872	1.218	7.984	1.00	11.26	S
ATOM	498	N	GLU A 283	12.922	-0.888	5.986	1.00	11.92	N
ATOM	499	CA	GLU A 283	11.803	-1.086	5.049	1.00	13.27	C
ATOM	500	C	GLU A 283	10.470	-0.904	5.801	1.00	13.55	C
ATOM	501	O	GLU A 283	9.536	-0.259	5.314	1.00	15.06	O
ATOM	502	CB	GLU A 283	11.860	-2.497	4.452	1.00	13.55	C
ATOM	503	CG	GLU A 283	13.134	-2.773	3.652	1.00	15.58	C
ATOM	504	CD	GLU A 283	13.274	-4.240	3.248	1.00	17.59	C
ATOM	505	OE1	GLU A 283	12.502	-5.085	3.748	1.00	18.91	O
ATOM	506	OE2	GLU A 283	14.174	-4.551	2.442	1.00	18.06	O
ATOM	507	N	LYS A 284	10.379	-1.496	6.983	1.00	14.48	N
ATOM	508	CA	LYS A 284	9.174	-1.385	7.804	1.00	14.83	C
ATOM	509	C	LYS A 284	8.881	0.087	8.139	1.00	14.80	C
ATOM	510	O	LYS A 284	7.743	0.560	8.026	1.00	14.05	O
ATOM	511	CB	LYS A 284	9.366	-2.173	9.107	1.00	19.32	C
ATOM	512	CG	LYS A 284	9.568	-3.675	8.913	1.00	24.26	C
ATOM	513	CD	LYS A 284	9.711	-4.417	10.242	1.00	28.81	C
ATOM	514	CE	LYS A 284	9.692	-5.926	10.035	1.00	31.79	C
ATOM	515	NZ	LYS A 284	9.822	-6.658	11.327	1.00	35.72	N
ATOM	516	N	ALA A 285	9.918	0.811	8.549	1.00	13.24	N
ATOM	517	CA	ALA A 285	9.773	2.218	8.910	1.00	13.36	C
ATOM	518	C	ALA A 285	9.250	3.041	7.749	1.00	13.81	C
ATOM	519	O	ALA A 285	8.398	3.914	7.931	1.00	13.73	O
ATOM	520	CB	ALA A 285	11.119	2.788	9.378	1.00	12.05	C
ATOM	521	N	ILE A 286	9.776	2.779	6.556	1.00	14.39	N
ATOM	522	CA	ILE A 286	9.349	3.516	5.371	1.00	15.84	C
ATOM	523	C	ILE A 286	7.876	3.218	5.063	1.00	17.47	C
ATOM	524	O	ILE A 286	7.117	4.113	4.684	1.00	17.58	O
ATOM	525	CB	ILE A 286	10.246	3.169	4.163	1.00	15.80	C
ATOM	526	CG1	ILE A 286	11.630	3.827	4.353	1.00	15.22	C
ATOM	527	CG2	ILE A 286	9.597	3.630	2.872	1.00	16.23	C
ATOM	528	CD1	ILE A 286	12.701	3.304	3.396	1.00	15.18	C
ATOM	529	N	GLU A 287	7.480	1.965	5.234	1.00	18.94	N
ATOM	530	CA	GLU A 287	6.090	1.587	5.010	1.00	22.08	C
ATOM	531	C	GLU A 287	5.212	2.469	5.901	1.00	22.36	C
ATOM	532	O	GLU A 287	4.282	3.124	5.414	1.00	21.82	O
ATOM	533	CB	GLU A 287	5.875	0.124	5.383	1.00	24.23	C
ATOM	534	CG	GLU A 287	5.714	-0.818	4.217	1.00	29.64	C
ATOM	535	CD	GLU A 287	5.509	-2.249	4.683	1.00	32.36	C
ATOM	536	OE1	GLU A 287	4.843	-2.440	5.723	1.00	33.92	O
ATOM	537	OE2	GLU A 287	6.004	-3.183	4.013	1.00	35.47	O
ATOM	538	N	VAL A 288	5.520	2.480	7.203	1.00	22.22	N
ATOM	539	CA	VAL A 288	4.778	3.275	8.178	1.00	23.03	C
ATOM	540	C	VAL A 288	4.805	4.754	7.815	1.00	23.20	C
ATOM	541	O	VAL A 288	3.791	5.444	7.903	1.00	24.45	O
ATOM	542	CB	VAL A 288	5.362	3.131	9.615	1.00	22.87	C
ATOM	543	CG1	VAL A 288	4.675	4.114	10.553	1.00	23.02	C
ATOM	544	CG2	VAL A 288	5.195	1.710	10.121	1.00	21.88	C
ATOM	545	N	GLY A 289	5.976	5.234	7.412	1.00	24.37	N
ATOM	546	CA	GLY A 289	6.132	6.632	7.053	1.00	25.12	C
ATOM	547	C	GLY A 289	5.348	7.079	5.832	1.00	26.61	C
ATOM	548	O	GLY A 289	4.853	8.202	5.802	1.00	27.06	O
ATOM	549	N	ARG A 290	5.237	6.224	4.820	1.00	28.01	N
ATOM	550	CA	ARG A 290	4.493	6.594	3.617	1.00	30.89	C
ATOM	551	C	ARG A 290	3.016	6.832	3.968	1.00	33.25	C
ATOM	552	O	ARG A 290	2.319	7.587	3.285	1.00	32.98	O

Fork-Frg 3E

ATOM	553	CB	ARG A 290	4.605	5.497	2.551	1.00	31.51	C
ATOM	554	CG	ARG A 290	6.012	5.273	1.986	1.00	31.71	C
ATOM	555	CD	ARG A 290	6.473	6.453	1.144	1.00	32.21	C
ATOM	556	NE	ARG A 290	7.773	6.212	0.521	1.00	31.74	N
ATOM	557	CZ	ARG A 290	8.456	7.126	-0.160	1.00	32.10	C
ATOM	558	NH1	ARG A 290	7.964	8.347	-0.311	1.00	32.30	N
ATOM	559	NH2	ARG A 290	9.635	6.825	-0.690	1.00	30.91	N
ATOM	560	N	GLU A 291	2.546	6.183	5.034	1.00	34.95	N
ATOM	561	CA	GLU A 291	1.163	6.338	5.472	1.00	37.47	C
ATOM	562	C	GLU A 291	0.944	7.795	5.866	1.00	39.02	C
ATOM	563	O	GLU A 291	-0.044	8.416	5.471	1.00	40.27	O
ATOM	564	CB	GLU A 291	0.876	5.418	6.647	1.00	36.88	C
ATOM	565	N	ASN A 292	1.868	8.339	6.651	1.00	40.07	N
ATOM	566	CA	ASN A 292	1.796	9.736	7.061	1.00	41.59	C
ATOM	567	C	ASN A 292	2.691	10.497	6.080	1.00	42.72	C
ATOM	568	O	ASN A 292	3.911	10.569	6.256	1.00	44.19	O
ATOM	569	CB	ASN A 292	2.308	9.894	8.488	1.00	41.95	C
ATOM	570	N	ARG A 293	2.075	11.060	5.047	1.00	42.83	N
ATOM	571	CA	ARG A 293	2.791	11.783	3.997	1.00	42.16	C
ATOM	572	C	ARG A 293	3.566	13.053	4.371	1.00	41.39	C
ATOM	573	O	ARG A 293	3.711	13.948	3.534	1.00	42.55	O
ATOM	574	CB	ARG A 293	1.814	12.098	2.856	1.00	42.99	C
ATOM	575	N	GLU A 294	4.079	13.145	5.595	1.00	39.28	N
ATOM	576	CA	GLU A 294	4.837	14.335	5.990	1.00	36.23	C
ATOM	577	C	GLU A 294	6.245	13.997	6.497	1.00	34.12	C
ATOM	578	O	GLU A 294	7.018	14.892	6.864	1.00	33.56	O
ATOM	579	CB	GLU A 294	4.073	15.105	7.059	1.00	36.27	C
ATOM	580	N	ASP A 295	6.578	12.708	6.504	1.00	30.85	N
ATOM	581	CA	ASP A 295	7.878	12.249	6.997	1.00	28.20	C
ATOM	582	C	ASP A 295	8.975	12.139	5.942	1.00	24.72	C
ATOM	583	O	ASP A 295	9.859	11.292	6.082	1.00	23.02	O
ATOM	584	CB	ASP A 295	7.747	10.870	7.657	1.00	30.05	C
ATOM	585	CG	ASP A 295	6.814	10.867	8.848	1.00	31.58	C
ATOM	586	OD1	ASP A 295	6.886	11.809	9.664	1.00	32.11	O
ATOM	587	OD2	ASP A 295	6.025	9.899	8.970	1.00	32.10	O
ATOM	588	N	TYR A 296	8.949	12.979	4.909	1.00	20.53	N
ATOM	589	CA	TYR A 296	9.971	12.862	3.874	1.00	17.81	C
ATOM	590	C	TYR A 296	11.406	12.897	4.397	1.00	15.19	C
ATOM	591	O	TYR A 296	12.264	12.197	3.879	1.00	14.24	O
ATOM	592	CB	TYR A 296	9.765	13.922	2.770	1.00	16.84	C
ATOM	593	CG	TYR A 296	10.075	15.352	3.164	1.00	15.84	C
ATOM	594	CD1	TYR A 296	11.334	15.915	2.908	1.00	15.49	C
ATOM	595	CD2	TYR A 296	9.116	16.143	3.781	1.00	16.25	C
ATOM	596	CE1	TYR A 296	11.620	17.236	3.269	1.00	15.42	C
ATOM	597	CE2	TYR A 296	9.390	17.465	4.143	1.00	15.31	C
ATOM	598	CZ	TYR A 296	10.638	18.002	3.888	1.00	15.06	C
ATOM	599	OH	TYR A 296	10.899	19.298	4.258	1.00	13.91	O
ATOM	600	N	ARG A 297	11.686	13.707	5.409	1.00	14.95	N
ATOM	601	CA	ARG A 297	13.049	13.757	5.936	1.00	14.90	C
ATOM	602	C	ARG A 297	13.427	12.457	6.650	1.00	15.40	C
ATOM	603	O	ARG A 297	14.569	12.015	6.555	1.00	14.55	O
ATOM	604	CB	ARG A 297	13.223	14.921	6.918	1.00	17.07	C
ATOM	605	CG	ARG A 297	13.337	16.303	6.283	1.00	16.31	C
ATOM	606	CD	ARG A 297	13.381	17.362	7.383	1.00	18.68	C
ATOM	607	NE	ARG A 297	13.608	18.723	6.889	1.00	18.15	N
ATOM	608	CZ	ARG A 297	13.710	19.786	7.683	1.00	17.81	C
ATOM	609	NH1	ARG A 297	13.602	19.648	8.999	1.00	18.31	N
ATOM	610	NH2	ARG A 297	13.931	20.984	7.171	1.00	17.88	N
ATOM	611	N	GLN A 298	12.483	11.847	7.366	1.00	14.55	N

Forb. Fig 3E

ATOM	612	CA	GLN A 298	12.803	10.611	8.082	1.00	15.28	C
ATOM	613	C	GLN A 298	12.901	9.434	7.130	1.00	13.55	C
ATOM	614	O	GLN A 298	13.624	8.477	7.393	1.00	11.43	O
ATOM	615	CB	GLN A 298	11.772	10.310	9.168	1.00	17.34	C
ATOM	616	CG	GLN A 298	12.311	9.356	10.258	1.00	19.46	C
ATOM	617	CD	GLN A 298	13.485	9.959	11.060	1.00	21.07	C
ATOM	618	OE1	GLN A 298	13.581	11.181	11.222	1.00	20.97	O
ATOM	619	NE2	GLN A 298	14.362	9.096	11.582	1.00	19.68	N
ATOM	620	N	ILE A 299	12.158	9.508	6.030	1.00	12.40	N
ATOM	621	CA	ILE A 299	12.203	8.471	5.009	1.00	12.02	C
ATOM	622	C	ILE A 299	13.581	8.539	4.350	1.00	11.49	C
ATOM	623	O	ILE A 299	14.177	7.514	4.011	1.00	10.07	O
ATOM	624	CB	ILE A 299	11.108	8.702	3.947	1.00	13.45	C
ATOM	625	CG1	ILE A 299	9.740	8.401	4.561	1.00	15.50	C
ATOM	626	CG2	ILE A 299	11.346	7.820	2.720	1.00	13.19	C
ATOM	627	CD1	ILE A 299	8.598	8.678	3.643	1.00	18.57	C
ATOM	628	N	ALA A 300	14.067	9.758	4.132	1.00	9.35	N
ATOM	629	CA	ALA A 300	15.393	9.944	3.543	1.00	9.44	C
ATOM	630	C	ALA A 300	16.422	9.295	4.470	1.00	9.42	C
ATOM	631	O	ALA A 300	17.378	8.672	4.022	1.00	9.90	O
ATOM	632	CB	ALA A 300	15.690	11.426	3.403	1.00	9.83	C
ATOM	633	N	LYS A 301	16.237	9.485	5.773	1.00	9.52	N
ATOM	634	CA	LYS A 301	17.141	8.898	6.757	1.00	10.34	C
ATOM	635	C	LYS A 301	17.098	7.373	6.708	1.00	10.42	C
ATOM	636	O	LYS A 301	18.147	6.721	6.830	1.00	9.83	O
ATOM	637	CB	LYS A 301	16.771	9.367	8.170	1.00	11.18	C
ATOM	638	CG	LYS A 301	17.155	10.823	8.470	1.00	11.21	C
ATOM	639	CD	LYS A 301	16.746	11.214	9.887	1.00	15.17	C
ATOM	640	CE	LYS A 301	17.159	12.637	10.218	1.00	17.10	C
ATOM	641	NZ	LYS A 301	16.715	13.003	11.589	1.00	18.96	N
ATOM	642	N	ALA A 302	15.892	6.813	6.539	1.00	9.48	N
ATOM	643	CA	ALA A 302	15.725	5.363	6.496	1.00	9.56	C
ATOM	644	C	ALA A 302	16.449	4.802	5.285	1.00	10.73	C
ATOM	645	O	ALA A 302	17.139	3.791	5.386	1.00	11.34	O
ATOM	646	CB	ALA A 302	14.246	4.982	6.446	1.00	10.76	C
ATOM	647	N	TYR A 303	16.267	5.442	4.136	1.00	10.47	N
ATOM	648	CA	TYR A 303	16.965	5.015	2.916	1.00	10.31	C
ATOM	649	C	TYR A 303	18.481	5.127	3.115	1.00	10.97	C
ATOM	650	O	TYR A 303	19.235	4.260	2.676	1.00	10.42	O
ATOM	651	CB	TYR A 303	16.571	5.901	1.731	1.00	10.56	C
ATOM	652	CG	TYR A 303	15.256	5.563	1.069	1.00	11.70	C
ATOM	653	CD1	TYR A 303	14.382	6.574	0.687	1.00	12.99	C
ATOM	654	CD2	TYR A 303	14.908	4.240	0.764	1.00	12.77	C
ATOM	655	CE1	TYR A 303	13.191	6.292	0.013	1.00	14.69	C
ATOM	656	CE2	TYR A 303	13.712	3.943	0.086	1.00	13.64	C
ATOM	657	CZ	TYR A 303	12.862	4.981	-0.287	1.00	14.41	C
ATOM	658	OH	TYR A 303	11.703	4.731	-0.985	1.00	14.48	O
ATOM	659	N	ALA A 304	18.936	6.203	3.761	1.00	9.30	N
ATOM	660	CA	ALA A 304	20.375	6.371	3.954	1.00	9.75	C
ATOM	661	C	ALA A 304	20.954	5.266	4.834	1.00	9.52	C
ATOM	662	O	ALA A 304	22.058	4.782	4.584	1.00	9.58	O
ATOM	663	CB	ALA A 304	20.678	7.763	4.547	1.00	11.24	C
ATOM	664	N	ARG A 305	20.200	4.851	5.849	1.00	8.32	N
ATOM	665	CA	ARG A 305	20.645	3.784	6.746	1.00	9.54	C
ATOM	666	C	ARG A 305	20.762	2.465	5.979	1.00	8.60	C
ATOM	667	O	ARG A 305	21.688	1.694	6.207	1.00	10.72	O
ATOM	668	CB	ARG A 305	19.657	3.625	7.918	1.00	8.94	C
ATOM	669	CG	ARG A 305	20.077	2.571	8.946	1.00	9.91	C
ATOM	670	CD	ARG A 305	19.677	2.989	10.376	1.00	9.83	C

Forb. Fig 3^e

ATOM	671	NE	ARG	A	305	20.425	4.185	10.756	1.00	10.12	N
ATOM	672	CZ	ARG	A	305	19.963	5.139	11.553	1.00	11.28	C
ATOM	673	NH1	ARG	A	305	18.742	5.042	12.094	1.00	9.73	N
ATOM	674	NH2	ARG	A	305	20.680	6.238	11.732	1.00	10.32	N
ATOM	675	N	ILE	A	306	19.822	2.199	5.076	1.00	8.55	N
ATOM	676	CA	ILE	A	306	19.899	0.973	4.277	1.00	9.67	C
ATOM	677	C	ILE	A	306	21.200	1.088	3.477	1.00	10.72	C
ATOM	678	O	ILE	A	306	21.986	0.142	3.389	1.00	11.03	O
ATOM	679	CB	ILE	A	306	18.711	0.845	3.272	1.00	9.64	C
ATOM	680	CG1	ILE	A	306	17.394	0.652	4.032	1.00	9.52	C
ATOM	681	CG2	ILE	A	306	18.981	-0.328	2.283	1.00	10.05	C
ATOM	682	CD1	ILE	A	306	16.113	0.638	3.139	1.00	9.39	C
ATOM	683	N	GLY	A	307	21.412	2.262	2.893	1.00	11.57	N
ATOM	684	CA	GLY	A	307	22.613	2.496	2.111	1.00	9.94	C
ATOM	685	C	GLY	A	307	23.855	2.217	2.930	1.00	11.89	C
ATOM	686	O	GLY	A	307	24.767	1.539	2.467	1.00	11.75	O
ATOM	687	N	ASN	A	308	23.893	2.740	4.153	1.00	11.22	N
ATOM	688	CA	ASN	A	308	25.043	2.528	5.018	1.00	13.08	C
ATOM	689	C	ASN	A	308	25.303	1.052	5.330	1.00	12.12	C
ATOM	690	O	ASN	A	308	26.461	0.619	5.384	1.00	12.62	O
ATOM	691	CB	ASN	A	308	24.875	3.302	6.321	1.00	16.09	C
ATOM	692	CG	ASN	A	308	25.165	4.782	6.161	1.00	20.57	C
ATOM	693	OD1	ASN	A	308	25.626	5.237	5.109	1.00	20.95	O
ATOM	694	ND2	ASN	A	308	24.921	5.543	7.223	1.00	24.66	N
ATOM	695	N	SER	A	309	24.240	0.281	5.538	1.00	11.41	N
ATOM	696	CA	SER	A	309	24.384	-1.146	5.836	1.00	10.73	C
ATOM	697	C	SER	A	309	25.003	-1.894	4.641	1.00	11.70	C
ATOM	698	O	SER	A	309	25.783	-2.843	4.817	1.00	11.35	O
ATOM	699	CB	SER	A	309	23.019	-1.752	6.210	1.00	11.81	C
ATOM	700	OG	SER	A	309	22.148	-1.814	5.091	1.00	12.59	O
ATOM	701	N	TYR	A	310	24.664	-1.478	3.422	1.00	11.88	N
ATOM	702	CA	TYR	A	310	25.267	-2.112	2.251	1.00	12.41	C
ATOM	703	C	TYR	A	310	26.732	-1.663	2.166	1.00	14.36	C
ATOM	704	O	TYR	A	310	27.617	-2.449	1.813	1.00	15.59	O
ATOM	705	CB	TYR	A	310	24.523	-1.724	0.971	1.00	12.41	C
ATOM	706	CG	TYR	A	310	23.287	-2.577	0.727	1.00	12.87	C
ATOM	707	CD1	TYR	A	310	22.014	-2.005	0.656	1.00	11.49	C
ATOM	708	CD2	TYR	A	310	23.397	-3.963	0.585	1.00	12.03	C
ATOM	709	CE1	TYR	A	310	20.879	-2.792	0.445	1.00	10.10	C
ATOM	710	CE2	TYR	A	310	22.266	-4.763	0.379	1.00	12.48	C
ATOM	711	CZ	TYR	A	310	21.012	-4.169	0.308	1.00	11.38	C
ATOM	712	OH	TYR	A	310	19.896	-4.962	0.113	1.00	13.14	O
ATOM	713	N	PHE	A	311	26.985	-0.401	2.505	1.00	13.60	N
ATOM	714	CA	PHE	A	311	28.347	0.133	2.464	1.00	15.77	C
ATOM	715	C	PHE	A	311	29.248	-0.656	3.410	1.00	15.66	C
ATOM	716	O	PHE	A	311	30.367	-1.016	3.047	1.00	16.03	O
ATOM	717	CB	PHE	A	311	28.358	1.616	2.857	1.00	14.85	C
ATOM	718	CG	PHE	A	311	29.692	2.306	2.640	1.00	17.18	C
ATOM	719	CD1	PHE	A	311	29.859	3.214	1.596	1.00	18.43	C
ATOM	720	CD2	PHE	A	311	30.770	2.052	3.484	1.00	18.44	C
ATOM	721	CE1	PHE	A	311	31.080	3.861	1.395	1.00	21.56	C
ATOM	722	CE2	PHE	A	311	32.005	2.696	3.296	1.00	20.93	C
ATOM	723	CZ	PHE	A	311	32.161	3.596	2.256	1.00	21.37	C
ATOM	724	N	LYS	A	312	28.767	-0.919	4.621	1.00	17.07	N
ATOM	725	CA	LYS	A	312	29.550	-1.679	5.606	1.00	18.12	C
ATOM	726	C	LYS	A	312	29.970	-3.025	5.060	1.00	18.25	C
ATOM	727	O	LYS	A	312	31.070	-3.513	5.344	1.00	19.17	O
ATOM	728	CB	LYS	A	312	28.743	-1.925	6.884	1.00	19.67	C
ATOM	729	CG	LYS	A	312	28.546	-0.720	7.753	1.00	20.65	C

Form. Fig 3E

ATOM	730	CD	LYS A 312	29.879	-0.161	8.235	1.00	24.02	C
ATOM	731	CE	LYS A 312	30.595	-1.120	9.158	1.00	24.05	C
ATOM	732	NZ	LYS A 312	31.904	-0.528	9.613	1.00	26.62	N
ATOM	733	N	GLU A 313	29.079	-3.643	4.290	1.00	17.07	N
ATOM	734	CA	GLU A 313	29.348	-4.947	3.715	1.00	17.54	C
ATOM	735	C	GLU A 313	30.078	-4.875	2.370	1.00	17.28	C
ATOM	736	O	GLU A 313	30.210	-5.883	1.697	1.00	18.13	O
ATOM	737	CB	GLU A 313	28.032	-5.725	3.544	1.00	16.66	C
ATOM	738	CG	GLU A 313	27.292	-5.986	4.858	1.00	14.84	C
ATOM	739	CD	GLU A 313	26.101	-6.902	4.659	1.00	14.97	C
ATOM	740	OE1	GLU A 313	25.210	-6.540	3.870	1.00	16.46	O
ATOM	741	OE2	GLU A 313	26.061	-7.980	5.285	1.00	14.63	O
ATOM	742	N	GLU A 314	30.528	-3.691	1.973	1.00	18.86	N
ATOM	743	CA	GLU A 314	31.255	-3.541	0.703	1.00	19.16	C
ATOM	744	C	GLU A 314	30.404	-3.840	-0.528	1.00	18.30	C
ATOM	745	O	GLU A 314	30.942	-4.204	-1.578	1.00	17.65	O
ATOM	746	CB	GLU A 314	32.500	-4.455	0.683	1.00	21.26	C
ATOM	747	CG	GLU A 314	33.630	-4.011	1.606	1.00	25.79	C
ATOM	748	CD	GLU A 314	34.746	-5.052	1.735	1.00	27.80	C
ATOM	749	OE1	GLU A 314	34.879	-5.930	0.850	1.00	30.48	O
ATOM	750	OE2	GLU A 314	35.500	-4.986	2.726	1.00	27.68	O
ATOM	751	N	LYS A 315	29.082	-3.699	-0.399	1.00	16.30	N
ATOM	752	CA	LYS A 315	28.146	-3.949	-1.507	1.00	14.80	C
ATOM	753	C	LYS A 315	27.818	-2.546	-2.022	1.00	14.84	C
ATOM	754	O	LYS A 315	26.708	-2.050	-1.889	1.00	13.36	O
ATOM	755	CB	LYS A 315	26.895	-4.675	-0.971	1.00	14.13	C
ATOM	756	CG	LYS A 315	27.213	-6.071	-0.393	1.00	13.81	C
ATOM	757	CD	LYS A 315	26.048	-6.673	0.405	1.00	12.48	C
ATOM	758	CE	LYS A 315	26.404	-8.035	0.981	1.00	13.79	C
ATOM	759	NZ	LYS A 315	25.254	-8.620	1.749	1.00	13.20	N
ATOM	760	N	TYR A 316	28.824	-1.918	-2.623	1.00	14.31	N
ATOM	761	CA	TYR A 316	28.722	-0.544	-3.081	1.00	13.83	C
ATOM	762	C	TYR A 316	27.655	-0.103	-4.089	1.00	12.49	C
ATOM	763	O	TYR A 316	27.160	1.015	-3.971	1.00	12.45	O
ATOM	764	CB	TYR A 316	30.115	-0.089	-3.545	1.00	15.43	C
ATOM	765	CG	TYR A 316	31.157	-0.180	-2.444	1.00	16.83	C
ATOM	766	CD1	TYR A 316	32.251	-1.043	-2.560	1.00	17.77	C
ATOM	767	CD2	TYR A 316	31.047	0.592	-1.284	1.00	17.73	C
ATOM	768	CE1	TYR A 316	33.220	-1.137	-1.543	1.00	18.95	C
ATOM	769	CE2	TYR A 316	32.015	0.508	-0.259	1.00	19.23	C
ATOM	770	CZ	TYR A 316	33.098	-0.363	-0.403	1.00	19.34	C
ATOM	771	OH	TYR A 316	34.059	-0.462	0.591	1.00	21.89	O
ATOM	772	N	LYS A 317	27.309	-0.931	-5.078	1.00	12.49	N
ATOM	773	CA	LYS A 317	26.283	-0.536	-6.044	1.00	13.19	C
ATOM	774	C	LYS A 317	24.966	-0.298	-5.312	1.00	12.53	C
ATOM	775	O	LYS A 317	24.235	0.653	-5.609	1.00	12.15	O
ATOM	776	CB	LYS A 317	26.076	-1.614	-7.121	1.00	15.14	C
ATOM	777	CG	LYS A 317	27.080	-1.526	-8.269	1.00	17.03	C
ATOM	778	CD	LYS A 317	26.959	-2.694	-9.239	1.00	19.15	C
ATOM	779	CE	LYS A 317	28.022	-2.597	-10.347	1.00	19.95	C
ATOM	780	NZ	LYS A 317	27.815	-3.670	-11.380	1.00	22.94	N
ATOM	781	N	ASP A 318	24.659	-1.186	-4.374	1.00	12.70	N
ATOM	782	CA	ASP A 318	23.433	-1.072	-3.594	1.00	12.75	C
ATOM	783	C	ASP A 318	23.515	0.095	-2.618	1.00	10.78	C
ATOM	784	O	ASP A 318	22.519	0.762	-2.349	1.00	11.01	O
ATOM	785	CB	ASP A 318	23.158	-2.382	-2.858	1.00	11.77	C
ATOM	786	CG	ASP A 318	22.603	-3.462	-3.790	1.00	15.86	C
ATOM	787	OD1	ASP A 318	21.472	-3.300	-4.281	1.00	16.07	O
ATOM	788	OD2	ASP A 318	23.298	-4.460	-4.047	1.00	14.53	O

Forb. Fig 3E

ATOM	789	N	ALA A 319	24.703	0.361	-2.089	1.00	11.60	N
ATOM	790	CA	ALA A 319	24.835	1.485	-1.171	1.00	9.55	C
ATOM	791	C	ALA A 319	24.486	2.774	-1.934	1.00	10.62	C
ATOM	792	O	ALA A 319	23.637	3.549	-1.503	1.00	9.16	O
ATOM	793	CB	ALA A 319	26.276	1.557	-0.617	1.00	11.10	C
ATOM	794	N	ILE A 320	25.134	2.972	-3.082	1.00	10.25	N
ATOM	795	CA	ILE A 320	24.923	4.150	-3.939	1.00	10.80	C
ATOM	796	C	ILE A 320	23.465	4.289	-4.350	1.00	9.83	C
ATOM	797	O	ILE A 320	22.886	5.388	-4.328	1.00	9.29	O
ATOM	798	CB	ILE A 320	25.775	4.047	-5.236	1.00	11.07	C
ATOM	799	CG1	ILE A 320	27.256	4.181	-4.883	1.00	12.87	C
ATOM	800	CG2	ILE A 320	25.344	5.106	-6.243	1.00	13.80	C
ATOM	801	CD1	ILE A 320	28.198	3.751	-5.998	1.00	14.33	C
ATOM	802	N	HIS A 321	22.867	3.173	-4.732	1.00	9.91	N
ATOM	803	CA	HIS A 321	21.475	3.206	-5.154	1.00	8.97	C
ATOM	804	C	HIS A 321	20.550	3.739	-4.042	1.00	9.01	C
ATOM	805	O	HIS A 321	19.700	4.606	-4.281	1.00	9.05	O
ATOM	806	CB	HIS A 321	21.048	1.803	-5.607	1.00	7.77	C
ATOM	807	CG	HIS A 321	19.660	1.760	-6.154	1.00	6.76	C
ATOM	808	ND1	HIS A 321	19.184	2.700	-7.046	1.00	9.86	N
ATOM	809	CD2	HIS A 321	18.631	0.917	-5.908	1.00	7.99	C
ATOM	810	CE1	HIS A 321	17.921	2.440	-7.323	1.00	10.06	C
ATOM	811	NE2	HIS A 321	17.567	1.362	-6.644	1.00	5.82	N
ATOM	812	N	PHE A 322	20.715	3.244	-2.822	1.00	8.19	N
ATOM	813	CA	PHE A 322	19.882	3.732	-1.747	1.00	9.08	C
ATOM	814	C	PHE A 322	20.236	5.163	-1.317	1.00	8.38	C
ATOM	815	O	PHE A 322	19.387	5.878	-0.789	1.00	7.73	O
ATOM	816	CB	PHE A 322	19.906	2.761	-0.565	1.00	9.16	C
ATOM	817	CG	PHE A 322	18.970	1.604	-0.745	1.00	9.38	C
ATOM	818	CD1	PHE A 322	19.397	0.439	-1.367	1.00	9.25	C
ATOM	819	CD2	PHE A 322	17.624	1.722	-0.378	1.00	7.85	C
ATOM	820	CE1	PHE A 322	18.498	-0.602	-1.632	1.00	9.54	C
ATOM	821	CE2	PHE A 322	16.717	0.689	-0.636	1.00	8.80	C
ATOM	822	CZ	PHE A 322	17.154	-0.470	-1.264	1.00	8.01	C
ATOM	823	N	TYR A 323	21.478	5.591	-1.525	1.00	8.46	N
ATOM	824	CA	TYR A 323	21.809	6.978	-1.170	1.00	8.41	C
ATOM	825	C	TYR A 323	21.048	7.858	-2.156	1.00	8.46	C
ATOM	826	O	TYR A 323	20.559	8.926	-1.804	1.00	9.50	O
ATOM	827	CB	TYR A 323	23.316	7.242	-1.280	1.00	10.24	C
ATOM	828	CG	TYR A 323	24.147	6.535	-0.231	1.00	10.31	C
ATOM	829	CD1	TYR A 323	25.414	6.043	-0.534	1.00	12.33	C
ATOM	830	CD2	TYR A 323	23.679	6.383	1.078	1.00	12.57	C
ATOM	831	CE1	TYR A 323	26.200	5.410	0.444	1.00	12.62	C
ATOM	832	CE2	TYR A 323	24.460	5.760	2.062	1.00	13.90	C
ATOM	833	CZ	TYR A 323	25.715	5.278	1.735	1.00	15.14	C
ATOM	834	OH	TYR A 323	26.493	4.683	2.714	1.00	16.99	O
ATOM	835	N	ASN A 324	20.923	7.412	-3.398	1.00	8.66	N
ATOM	836	CA	ASN A 324	20.172	8.205	-4.367	1.00	11.90	C
ATOM	837	C	ASN A 324	18.689	8.296	-3.989	1.00	11.35	C
ATOM	838	O	ASN A 324	18.074	9.359	-4.110	1.00	11.23	O
ATOM	839	CB	ASN A 324	20.366	7.644	-5.781	1.00	14.69	C
ATOM	840	CG	ASN A 324	21.727	8.011	-6.342	1.00	18.39	C
ATOM	841	OD1	ASN A 324	22.200	9.120	-6.118	1.00	22.49	O
ATOM	842	ND2	ASN A 324	22.358	7.096	-7.066	1.00	23.13	N
ATOM	843	N	LYS A 325	18.111	7.199	-3.524	1.00	11.04	N
ATOM	844	CA	LYS A 325	16.715	7.238	-3.094	1.00	11.19	C
ATOM	845	C	LYS A 325	16.585	8.251	-1.951	1.00	11.99	C
ATOM	846	O	LYS A 325	15.636	9.052	-1.899	1.00	11.79	O
ATOM	847	CB	LYS A 325	16.258	5.858	-2.609	1.00	12.81	C

Forb. Fig 5E

ATOM	848	CG	LYS A 325	15.979	4.826	-3.726	1.00	13.65	C
ATOM	849	CD	LYS A 325	15.410	3.553	-3.097	1.00	15.43	C
ATOM	850	CE	LYS A 325	15.681	2.303	-3.925	1.00	17.76	C
ATOM	851	NZ	LYS A 325	14.845	2.359	-5.139	1.00	16.81	N
ATOM	852	N	SER A 326	17.553	8.212	-1.037	1.00	11.08	N
ATOM	853	CA	SER A 326	17.579	9.122	0.104	1.00	10.61	C
ATOM	854	C	SER A 326	17.676	10.582	-0.348	1.00	11.63	C
ATOM	855	O	SER A 326	16.855	11.424	0.032	1.00	11.42	O
ATOM	856	CB	SER A 326	18.770	8.784	1.004	1.00	9.73	C
ATOM	857	OG	SER A 326	18.928	9.742	2.052	1.00	9.05	O
ATOM	858	N	LEU A 327	18.680	10.885	-1.163	1.00	11.28	N
ATOM	859	CA	LEU A 327	18.875	12.253	-1.635	1.00	12.01	C
ATOM	860	C	LEU A 327	17.659	12.831	-2.357	1.00	12.40	C
ATOM	861	O	LEU A 327	17.343	14.022	-2.189	1.00	12.26	O
ATOM	862	CB	LEU A 327	20.107	12.324	-2.530	1.00	14.29	C
ATOM	863	CG	LEU A 327	21.423	12.047	-1.789	1.00	14.59	C
ATOM	864	CD1	LEU A 327	22.550	11.849	-2.788	1.00	16.37	C
ATOM	865	CD2	LEU A 327	21.729	13.215	-0.843	1.00	15.57	C
ATOM	866	N	ALA A 328	16.970	12.006	-3.147	1.00	11.72	N
ATOM	867	CA	ALA A 328	15.784	12.472	-3.875	1.00	13.20	C
ATOM	868	C	ALA A 328	14.691	12.952	-2.911	1.00	14.70	C
ATOM	869	O	ALA A 328	13.965	13.921	-3.200	1.00	14.84	O
ATOM	870	CB	ALA A 328	15.235	11.346	-4.785	1.00	14.87	C
ATOM	871	N	GLU A 329	14.554	12.268	-1.774	1.00	13.75	N
ATOM	872	CA	GLU A 329	13.571	12.672	-0.780	1.00	14.76	C
ATOM	873	C	GLU A 329	14.066	13.938	-0.082	1.00	13.74	C
ATOM	874	O	GLU A 329	13.333	14.915	0.035	1.00	12.31	O
ATOM	875	CB	GLU A 329	13.355	11.573	0.274	1.00	16.40	C
ATOM	876	CG	GLU A 329	12.916	10.244	-0.287	1.00	19.75	C
ATOM	877	CD	GLU A 329	11.479	10.229	-0.808	1.00	23.27	C
ATOM	878	OE1	GLU A 329	11.179	9.331	-1.619	1.00	25.32	O
ATOM	879	OE2	GLU A 329	10.660	11.091	-0.407	1.00	23.95	O
ATOM	880	N	HIS A 330	15.325	13.933	0.359	1.00	13.27	N
ATOM	881	CA	HIS A 330	15.878	15.093	1.065	1.00	12.68	C
ATOM	882	C	HIS A 330	17.386	15.096	0.914	1.00	14.14	C
ATOM	883	O	HIS A 330	18.045	14.133	1.306	1.00	11.74	O
ATOM	884	CB	HIS A 330	15.521	15.008	2.554	1.00	12.84	C
ATOM	885	CG	HIS A 330	15.960	16.190	3.362	1.00	13.55	C
ATOM	886	ND1	HIS A 330	16.454	16.071	4.645	1.00	14.08	N
ATOM	887	CD2	HIS A 330	15.906	17.521	3.102	1.00	12.46	C
ATOM	888	CE1	HIS A 330	16.679	17.275	5.141	1.00	15.70	C
ATOM	889	NE2	HIS A 330	16.353	18.171	4.225	1.00	13.85	N
ATOM	890	N	ARG A 331	17.942	16.159	0.337	1.00	13.54	N
ATOM	891	CA	ARG A 331	19.392	16.199	0.180	1.00	14.91	C
ATOM	892	C	ARG A 331	20.067	16.633	1.452	1.00	14.87	C
ATOM	893	O	ARG A 331	19.664	17.614	2.071	1.00	14.75	O
ATOM	894	CB	ARG A 331	19.799	17.131	-0.955	1.00	15.79	C
ATOM	895	CG	ARG A 331	19.459	16.555	-2.307	1.00	18.89	C
ATOM	896	CD	ARG A 331	19.980	17.412	-3.400	1.00	19.34	C
ATOM	897	NE	ARG A 331	21.402	17.222	-3.656	1.00	18.40	N
ATOM	898	CZ	ARG A 331	21.919	16.265	-4.421	1.00	19.04	C
ATOM	899	NH1	ARG A 331	21.141	15.373	-5.016	1.00	17.29	N
ATOM	900	NH2	ARG A 331	23.221	16.241	-4.633	1.00	19.21	N
ATOM	901	N	THR A 332	21.097	15.889	1.839	1.00	14.69	N
ATOM	902	CA	THR A 332	21.857	16.185	3.045	1.00	14.52	C
ATOM	903	C	THR A 332	23.323	16.053	2.679	1.00	15.86	C
ATOM	904	O	THR A 332	23.704	15.178	1.890	1.00	14.33	O
ATOM	905	CB	THR A 332	21.525	15.185	4.192	1.00	16.51	C
ATOM	906	OG1	THR A 332	21.862	13.853	3.779	1.00	14.00	O

Forb. Fig 3E

ATOM	907	CG2	THR	A	332	20.042	15.239	4.526	1.00	14.44	C
ATOM	908	N	PRO	A	333	24.168	16.937	3.231	1.00	15.96	N
ATOM	909	CA	PRO	A	333	25.597	16.884	2.935	1.00	16.56	C
ATOM	910	C	PRO	A	333	26.281	15.588	3.358	1.00	16.70	C
ATOM	911	O	PRO	A	333	27.165	15.103	2.651	1.00	18.14	O
ATOM	912	CB	PRO	A	333	26.149	18.123	3.652	1.00	17.32	C
ATOM	913	CG	PRO	A	333	25.160	18.351	4.771	1.00	19.44	C
ATOM	914	CD	PRO	A	333	23.839	18.064	4.118	1.00	17.50	C
ATOM	915	N	ASP	A	334	25.880	15.008	4.484	1.00	15.55	N
ATOM	916	CA	ASP	A	334	26.530	13.776	4.919	1.00	17.49	C
ATOM	917	C	ASP	A	334	26.239	12.620	3.970	1.00	16.12	C
ATOM	918	O	ASP	A	334	27.133	11.857	3.627	1.00	16.42	O
ATOM	919	CB	ASP	A	334	26.117	13.397	6.347	1.00	20.62	C
ATOM	920	CG	ASP	A	334	26.686	14.345	7.393	1.00	23.95	C
ATOM	921	OD1	ASP	A	334	27.723	14.987	7.125	1.00	25.57	O
ATOM	922	OD2	ASP	A	334	26.104	14.433	8.493	1.00	26.30	O
ATOM	923	N	VAL	A	335	24.995	12.485	3.529	1.00	15.06	N
ATOM	924	CA	VAL	A	335	24.687	11.394	2.618	1.00	12.77	C
ATOM	925	C	VAL	A	335	25.366	11.616	1.268	1.00	13.55	C
ATOM	926	O	VAL	A	335	25.842	10.667	0.644	1.00	12.02	O
ATOM	927	CB	VAL	A	335	23.164	11.237	2.414	1.00	13.58	C
ATOM	928	CG1	VAL	A	335	22.893	10.175	1.382	1.00	11.71	C
ATOM	929	CG2	VAL	A	335	22.509	10.859	3.730	1.00	12.98	C
ATOM	930	N	LEU	A	336	25.425	12.866	0.812	1.00	12.82	N
ATOM	931	CA	LEU	A	336	26.065	13.138	-0.463	1.00	14.09	C
ATOM	932	C	LEU	A	336	27.536	12.743	-0.377	1.00	15.24	C
ATOM	933	O	LEU	A	336	28.088	12.169	-1.308	1.00	14.91	O
ATOM	934	CB	LEU	A	336	25.964	14.621	-0.824	1.00	16.32	C
ATOM	935	CG	LEU	A	336	26.715	14.989	-2.113	1.00	17.71	C
ATOM	936	CD1	LEU	A	336	26.042	14.301	-3.300	1.00	18.09	C
ATOM	937	CD2	LEU	A	336	26.733	16.504	-2.321	1.00	19.49	C
ATOM	938	N	LYS	A	337	28.167	13.062	0.751	1.00	16.61	N
ATOM	939	CA	LYS	A	337	29.576	12.754	0.941	1.00	19.26	C
ATOM	940	C	LYS	A	337	29.795	11.236	0.934	1.00	18.57	C
ATOM	941	O	LYS	A	337	30.718	10.728	0.282	1.00	19.25	O
ATOM	942	CB	LYS	A	337	30.070	13.366	2.261	1.00	21.97	C
ATOM	943	CG	LYS	A	337	31.591	13.382	2.414	1.00	25.50	C
ATOM	944	CD	LYS	A	337	32.015	13.396	3.886	1.00	28.29	C
ATOM	945	CE	LYS	A	337	32.070	14.804	4.489	1.00	31.01	C
ATOM	946	NZ	LYS	A	337	33.256	15.585	4.001	1.00	32.80	N
ATOM	947	N	LYS	A	338	28.942	10.514	1.647	1.00	17.80	N
ATOM	948	CA	LYS	A	338	29.048	9.063	1.711	1.00	17.09	C
ATOM	949	C	LYS	A	338	28.878	8.487	0.298	1.00	16.82	C
ATOM	950	O	LYS	A	338	29.608	7.585	-0.111	1.00	17.68	O
ATOM	951	CB	LYS	A	338	27.969	8.514	2.647	1.00	18.31	C
ATOM	952	CG	LYS	A	338	28.146	7.065	3.053	1.00	21.04	C
ATOM	953	CD	LYS	A	338	29.372	6.871	3.944	1.00	24.64	C
ATOM	954	CE	LYS	A	338	29.309	5.541	4.688	1.00	25.32	C
ATOM	955	NZ	LYS	A	338	30.548	5.304	5.471	1.00	29.60	N
ATOM	956	N	CYS	A	339	27.911	9.017	-0.448	1.00	16.52	N
ATOM	957	CA	CYS	A	339	27.670	8.553	-1.806	1.00	15.95	C
ATOM	958	C	CYS	A	339	28.895	8.805	-2.685	1.00	16.50	C
ATOM	959	O	CYS	A	339	29.307	7.938	-3.453	1.00	14.41	O
ATOM	960	CB	CYS	A	339	26.447	9.265	-2.396	1.00	15.13	C
ATOM	961	SG	CYS	A	339	25.759	8.432	-3.873	1.00	17.53	S
ATOM	962	N	GLN	A	340	29.495	9.987	-2.567	1.00	16.71	N
ATOM	963	CA	GLN	A	340	30.667	10.283	-3.397	1.00	17.73	C
ATOM	964	C	GLN	A	340	31.793	9.311	-3.062	1.00	17.84	C
ATOM	965	O	GLN	A	340	32.486	8.819	-3.950	1.00	18.93	O

Forb. Fig 3E

ATOM	966	CB	GLN	A	340	31.096	11.740	-3.203	1.00	17.75	C
ATOM	967	CG	GLN	A	340	30.072	12.713	-3.796	1.00	21.58	C
ATOM	968	CD	GLN	A	340	30.305	14.150	-3.389	1.00	23.58	C
ATOM	969	OE1	GLN	A	340	30.767	14.424	-2.279	1.00	24.44	O
ATOM	970	NE2	GLN	A	340	29.965	15.080	-4.273	1.00	24.20	N
ATOM	971	N	GLN	A	341	31.946	9.005	-1.780	1.00	17.18	N
ATOM	972	CA	GLN	A	341	32.970	8.072	-1.342	1.00	18.25	C
ATOM	973	C	GLN	A	341	32.737	6.691	-1.980	1.00	17.85	C
ATOM	974	O	GLN	A	341	33.665	6.067	-2.512	1.00	16.51	O
ATOM	975	CB	GLN	A	341	32.931	7.956	0.181	1.00	20.82	C
ATOM	976	CG	GLN	A	341	33.974	7.030	0.740	1.00	25.77	C
ATOM	977	CD	GLN	A	341	33.957	6.985	2.255	1.00	29.14	C
ATOM	978	OE1	GLN	A	341	34.734	6.248	2.872	1.00	29.87	O
ATOM	979	NE2	GLN	A	341	33.071	7.776	2.866	1.00	28.76	N
ATOM	980	N	ALA	A	342	31.494	6.211	-1.913	1.00	16.24	N
ATOM	981	CA	ALA	A	342	31.144	4.911	-2.488	1.00	17.40	C
ATOM	982	C	ALA	A	342	31.333	4.924	-3.998	1.00	16.92	C
ATOM	983	O	ALA	A	342	31.738	3.924	-4.593	1.00	17.29	O
ATOM	984	CB	ALA	A	342	29.686	4.550	-2.148	1.00	14.88	C
ATOM	985	N	GLU	A	343	31.042	6.058	-4.618	1.00	18.17	N
ATOM	986	CA	GLU	A	343	31.189	6.161	-6.064	1.00	20.21	C
ATOM	987	C	GLU	A	343	32.659	6.055	-6.442	1.00	21.32	C
ATOM	988	O	GLU	A	343	33.012	5.391	-7.419	1.00	21.37	O
ATOM	989	CB	GLU	A	343	30.612	7.486	-6.569	1.00	20.93	C
ATOM	990	CG	GLU	A	343	29.091	7.523	-6.638	1.00	25.06	C
ATOM	991	CD	GLU	A	343	28.564	8.893	-7.025	1.00	27.73	C
ATOM	992	OE1	GLU	A	343	29.321	9.671	-7.644	1.00	29.88	O
ATOM	993	OE2	GLU	A	343	27.389	9.190	-6.724	1.00	30.09	O
ATOM	994	N	LYS	A	344	33.518	6.705	-5.661	1.00	21.94	N
ATOM	995	CA	LYS	A	344	34.946	6.677	-5.940	1.00	23.45	C
ATOM	996	C	LYS	A	344	35.493	5.260	-5.815	1.00	22.09	C
ATOM	997	O	LYS	A	344	36.282	4.812	-6.649	1.00	22.79	O
ATOM	998	CB	LYS	A	344	35.682	7.632	-4.993	1.00	25.23	C
ATOM	999	CG	LYS	A	344	36.976	8.184	-5.564	1.00	30.45	C
ATOM	1000	CD	LYS	A	344	37.349	9.510	-4.913	1.00	33.16	C
ATOM	1001	CE	LYS	A	344	38.497	10.185	-5.669	1.00	35.50	C
ATOM	1002	NZ	LYS	A	344	38.738	11.592	-5.219	1.00	36.06	N
ATOM	1003	N	ILE	A	345	35.066	4.546	-4.783	1.00	21.64	N
ATOM	1004	CA	ILE	A	345	35.520	3.177	-4.563	1.00	22.11	C
ATOM	1005	C	ILE	A	345	35.073	2.228	-5.681	1.00	23.98	C
ATOM	1006	O	ILE	A	345	35.859	1.399	-6.162	1.00	23.36	O
ATOM	1007	CB	ILE	A	345	35.006	2.634	-3.212	1.00	21.80	C
ATOM	1008	CG1	ILE	A	345	35.613	3.447	-2.065	1.00	22.47	C
ATOM	1009	CG2	ILE	A	345	35.371	1.168	-3.060	1.00	22.30	C
ATOM	1010	CD1	ILE	A	345	35.150	3.014	-0.684	1.00	21.75	C
ATOM	1011	N	LEU	A	346	33.816	2.359	-6.094	1.00	24.45	N
ATOM	1012	CA	LEU	A	346	33.251	1.513	-7.145	1.00	26.53	C
ATOM	1013	C	LEU	A	346	33.892	1.798	-8.498	1.00	28.73	C
ATOM	1014	O	LEU	A	346	34.284	0.872	-9.217	1.00	29.67	O
ATOM	1015	CB	LEU	A	346	31.733	1.736	-7.245	1.00	25.21	C
ATOM	1016	CG	LEU	A	346	30.946	0.912	-8.273	1.00	25.02	C
ATOM	1017	CD1	LEU	A	346	30.945	-0.550	-7.872	1.00	24.05	C
ATOM	1018	CD2	LEU	A	346	29.508	1.431	-8.357	1.00	24.33	C
ATOM	1019	N	LYS	A	347	33.988	3.077	-8.847	1.00	31.00	N
ATOM	1020	CA	LYS	A	347	34.567	3.474	-10.127	1.00	34.43	C
ATOM	1021	C	LYS	A	347	35.963	2.893	-10.303	1.00	35.65	C
ATOM	1022	O	LYS	A	347	36.299	2.392	-11.373	1.00	35.98	O
ATOM	1023	CB	LYS	A	347	34.617	5.004	-10.244	1.00	35.69	C
ATOM	1024	CG	LYS	A	347	35.101	5.512	-11.604	1.00	37.87	C

Forb. Fig. 3E

ATOM	1025	CD	LYS	A	347	35.034	7.032	-11.697	1.00	39.62	C
ATOM	1026	CE	LYS	A	347	35.578	7.535	-13.029	1.00	41.39	C
ATOM	1027	NZ	LYS	A	347	35.495	9.024	-13.154	1.00	42.61	N
ATOM	1028	N	GLU	A	348	36.768	2.954	-9.248	1.00	37.15	N
ATOM	1029	CA	GLU	A	348	38.127	2.432	-9.288	1.00	39.03	C
ATOM	1030	C	GLU	A	348	38.111	0.926	-9.511	1.00	40.35	C
ATOM	1031	O	GLU	A	348	38.986	0.383	-10.190	1.00	39.97	O
ATOM	1032	CB	GLU	A	348	38.855	2.761	-7.995	1.00	39.16	C
ATOM	1033	N	GLN	A	349	37.120	0.256	-8.930	1.00	41.34	N
ATOM	1034	CA	GLN	A	349	36.975	-1.189	-9.081	1.00	42.23	C
ATOM	1035	C	GLN	A	349	36.525	-1.501	-10.515	1.00	42.94	C
ATOM	1036	O	GLN	A	349	35.381	-1.963	-10.696	1.00	45.01	O
ATOM	1037	CB	GLN	A	349	35.940	-1.732	-8.083	1.00	42.16	C
ATOM	1038	CG	GLN	A	349	36.323	-1.589	-6.613	1.00	43.45	C
ATOM	1039	CD	GLN	A	349	35.258	-2.139	-5.662	1.00	44.81	C
ATOM	1040	OE1	GLN	A	349	34.085	-1.765	-5.737	1.00	45.39	O
ATOM	1041	NE2	GLN	A	349	35.667	-3.023	-4.758	1.00	44.41	N
TER	1042		GLN	A	349						
HETATM	1043	C	ACE	B	0	29.787	6.146	14.253	1.00	26.43	C
HETATM	1044	O	ACE	B	0	29.522	5.609	13.177	1.00	27.07	O
HETATM	1045	CH3	ACE	B	0	31.017	7.003	14.408	1.00	28.67	C
ATOM	1046	N	MET	B	1	29.024	6.022	15.331	1.00	16.60	N
ATOM	1047	CA	MET	B	1	27.812	5.207	15.332	1.00	16.08	C
ATOM	1048	C	MET	B	1	26.674	5.857	14.536	1.00	15.57	C
ATOM	1049	O	MET	B	1	26.634	7.080	14.364	1.00	13.81	O
ATOM	1050	CB	MET	B	1	27.321	5.003	16.775	1.00	17.95	C
ATOM	1051	CG	MET	B	1	28.316	4.395	17.733	1.00	19.71	C
ATOM	1052	SD	MET	B	1	27.637	4.387	19.409	1.00	23.85	S
ATOM	1053	CE	MET	B	1	26.477	3.039	19.283	1.00	19.76	C
ATOM	1054	N	GLU	B	2	25.743	5.030	14.064	1.00	15.61	N
ATOM	1055	CA	GLU	B	2	24.578	5.530	13.342	1.00	14.92	C
ATOM	1056	C	GLU	B	2	23.874	6.510	14.283	1.00	15.20	C
ATOM	1057	O	GLU	B	2	23.899	6.325	15.498	1.00	15.89	O
ATOM	1058	CB	GLU	B	2	23.629	4.370	12.994	1.00	14.50	C
ATOM	1059	CG	GLU	B	2	24.106	3.500	11.842	1.00	15.26	C
ATOM	1060	CD	GLU	B	2	24.145	4.277	10.544	1.00	15.63	C
ATOM	1061	OE1	GLU	B	2	23.066	4.598	10.006	1.00	15.54	O
ATOM	1062	OE2	GLU	B	2	25.252	4.589	10.068	1.00	15.63	O
ATOM	1063	N	GLU	B	3	23.247	7.541	13.728	1.00	15.41	N
ATOM	1064	CA	GLU	B	3	22.548	8.548	14.532	1.00	16.51	C
ATOM	1065	C	GLU	B	3	21.119	8.154	14.885	1.00	15.77	C
ATOM	1066	O	GLU	B	3	20.379	7.699	14.023	1.00	14.97	O
ATOM	1067	CB	GLU	B	3	22.488	9.881	13.770	1.00	19.71	C
ATOM	1068	CG	GLU	B	3	23.817	10.607	13.640	1.00	25.47	C
ATOM	1069	CD	GLU	B	3	23.729	11.832	12.729	1.00	29.25	C
ATOM	1070	OE1	GLU	B	3	22.762	12.622	12.864	1.00	30.05	O
ATOM	1071	OE2	GLU	B	3	24.636	12.003	11.882	1.00	32.05	O
ATOM	1072	N	VAL	B	4	20.726	8.332	16.146	1.00	15.94	N
ATOM	1073	CA	VAL	B	4	19.345	8.042	16.534	1.00	14.46	C
ATOM	1074	C	VAL	B	4	18.625	9.368	16.744	1.00	16.25	C
ATOM	1075	O	VAL	B	4	19.247	10.374	17.110	1.00	16.95	O
ATOM	1076	CB	VAL	B	4	19.225	7.183	17.815	1.00	12.41	C
ATOM	1077	CG1	VAL	B	4	19.621	5.735	17.508	1.00	11.08	C
ATOM	1078	CG2	VAL	B	4	20.075	7.757	18.931	1.00	12.26	C
ATOM	1079	N	ASP	B	5	17.316	9.362	16.512	1.00	16.26	N
ATOM	1080	CA	ASP	B	5	16.495	10.558	16.630	1.00	17.99	C
ATOM	1081	C	ASP	B	5	15.598	10.548	17.872	1.00	17.70	C
ATOM	1082	O	ASP	B	5	15.487	9.487	18.508	1.00	17.62	O
ATOM	1083	CB	ASP	B	5	15.634	10.684	15.373	1.00	19.95	C

Forb. Frig 3E

ATOM	1084	CG	ASP B	5	16.467	10.763	14.110	1.00	23.79	C
ATOM	1085	OD1	ASP B	5	17.101	11.813	13.898	1.00	23.66	O
ATOM	1086	OD2	ASP B	5	16.505	9.772	13.336	1.00	26.04	O
ATOM	1087	OXT	ASP B	5	15.006	11.605	18.175	1.00	18.22	O
TER	1088		ASP B	5						
HETATM	1089	NI	NI A	200	14.681	0.427	31.546	1.00	15.14	NI
HETATM	1090	O	HOH	1	23.659	1.608	-8.113	1.00	14.69	O
HETATM	1091	O	HOH	2	17.007	13.707	6.107	1.00	11.62	O
HETATM	1092	O	HOH	3	16.833	6.766	13.462	1.00	14.37	O
HETATM	1093	O	HOH	4	19.850	-8.014	3.880	1.00	15.48	O
HETATM	1094	O	HOH	5	13.356	8.364	-3.412	1.00	13.42	O
HETATM	1095	O	HOH	6	19.946	4.856	-8.488	1.00	13.86	O
HETATM	1096	O	HOH	7	9.892	0.953	29.815	1.00	19.90	O
HETATM	1097	O	HOH	8	6.509	3.190	16.073	1.00	18.80	O
HETATM	1098	O	HOH	9	18.816	11.824	5.129	1.00	13.51	O
HETATM	1099	O	HOH	10	13.326	9.881	29.400	1.00	20.34	O
HETATM	1100	O	HOH	11	28.833	-3.266	-5.769	1.00	20.67	O
HETATM	1101	O	HOH	12	23.291	-9.293	8.023	1.00	17.94	O
HETATM	1102	O	HOH	13	13.669	-0.876	0.179	1.00	19.20	O
HETATM	1103	O	HOH	14	12.580	-0.649	31.630	1.00	13.40	O
HETATM	1104	O	HOH	15	10.791	2.335	-1.002	1.00	19.23	O
HETATM	1105	O	HOH	16	22.638	4.151	-8.448	1.00	12.90	O
HETATM	1106	O	HOH	17	22.883	9.886	17.585	1.00	20.85	O
HETATM	1107	O	HOH	18	31.061	5.132	-9.499	1.00	17.54	O
HETATM	1108	O	HOH	19	13.830	-1.248	-2.915	1.00	18.51	O
HETATM	1109	O	HOH	20	23.789	-4.748	25.271	1.00	21.30	O
HETATM	1110	O	HOH	21	9.410	-0.357	2.586	1.00	15.06	O
HETATM	1111	O	HOH	22	29.200	11.553	5.320	1.00	25.33	O
HETATM	1112	O	HOH	23	24.028	-9.663	5.546	1.00	17.88	O
HETATM	1113	O	HOH	24	20.271	7.698	8.293	1.00	18.75	O
HETATM	1114	O	HOH	25	23.316	7.773	11.027	1.00	18.22	O
HETATM	1115	O	HOH	26	10.847	-5.447	5.834	1.00	25.97	O
HETATM	1116	O	HOH	27	28.301	2.586	6.398	1.00	19.68	O
HETATM	1117	O	HOH	28	28.483	17.134	0.958	1.00	22.74	O
HETATM	1118	O	HOH	29	21.007	-9.508	15.923	1.00	22.55	O
HETATM	1119	O	HOH	30	6.780	9.106	11.812	1.00	19.54	O
HETATM	1120	O	HOH	31	15.968	-2.715	1.432	1.00	25.88	O
HETATM	1121	O	HOH	32	26.271	19.337	-0.061	1.00	37.01	O
HETATM	1122	O	HOH	33	19.130	-10.997	10.304	1.00	24.77	O
HETATM	1123	O	HOH	34	27.840	4.354	10.746	1.00	30.88	O
HETATM	1124	O	HOH	35	11.379	0.094	0.760	1.00	20.90	O
HETATM	1125	O	HOH	36	17.765	-3.688	-0.230	1.00	18.47	O
HETATM	1126	O	HOH	37	10.203	13.012	-2.576	1.00	23.87	O
HETATM	1127	O	HOH	38	20.205	9.613	10.197	1.00	23.28	O
HETATM	1128	O	HOH	39	22.173	-11.685	9.442	1.00	26.34	O
HETATM	1129	O	HOH	40	8.374	3.290	-0.399	1.00	26.07	O
HETATM	1130	O	HOH	41	20.503	-6.680	21.882	1.00	22.95	O
HETATM	1131	O	HOH	42	30.070	2.798	26.668	1.00	22.10	O
HETATM	1132	O	HOH	43	17.319	-2.697	30.891	1.00	20.89	O
HETATM	1133	O	HOH	44	28.796	0.337	18.180	1.00	34.39	O
HETATM	1134	O	HOH	45	18.574	-2.721	-4.651	1.00	19.73	O
HETATM	1135	O	HOH	46	17.895	-7.810	23.079	1.00	39.08	O
HETATM	1136	O	HOH	47	9.951	-3.669	25.985	1.00	23.49	O
HETATM	1137	O	HOH	48	4.404	-0.882	16.557	1.00	41.50	O
HETATM	1138	O	HOH	49	1.256	7.925	26.912	1.00	33.66	O
HETATM	1139	O	HOH	50	33.676	8.691	-8.630	1.00	35.56	O
HETATM	1140	O	HOH	51	23.974	15.629	6.637	1.00	29.66	O
HETATM	1141	O	HOH	52	9.938	15.301	7.141	1.00	23.65	O
HETATM	1142	O	HOH	53	36.978	6.755	1.437	1.00	18.24	O

Forb. Fig 3E

HETATM 1143	O	HOH	54	27.546	19.447	7.135	1.00	39.82	O
HETATM 1144	O	HOH	55	18.212	14.922	8.053	1.00	25.04	O
HETATM 1145	O	HOH	56	26.989	21.487	5.483	1.00	42.56	O
HETATM 1146	O	HOH	57	7.167	1.111	1.394	1.00	26.13	O
HETATM 1147	O	HOH	58	13.975	-5.932	18.308	1.00	29.84	O
HETATM 1148	O	HOH	59	15.156	-1.463	30.109	1.00	17.30	O
HETATM 1149	O	HOH	60	15.378	-0.959	33.398	1.00	18.95	O
HETATM 1150	O	HOH	61	22.663	6.343	8.029	1.00	24.90	O
HETATM 1151	O	HOH	62	5.435	0.931	14.991	1.00	29.11	O
HETATM 1152	O	HOH	63	0.364	-0.659	20.270	1.00	23.25	O
HETATM 1153	O	HOH	64	12.260	3.426	-5.230	1.00	27.78	O
HETATM 1154	O	HOH	65	1.107	6.644	16.746	1.00	34.30	O
HETATM 1155	O	HOH	66	13.569	-5.116	-0.300	1.00	34.00	O
HETATM 1156	O	HOH	67	30.028	2.509	15.297	1.00	26.37	O
HETATM 1157	O	HOH	68	30.864	0.486	26.208	1.00	44.81	O
HETATM 1158	O	HOH	69	6.711	-2.757	20.560	1.00	21.27	O
HETATM 1159	O	HOH	70	2.900	1.991	3.431	1.00	36.57	O
HETATM 1160	O	HOH	71	18.738	10.930	-6.214	1.00	26.33	O
HETATM 1161	O	HOH	72	10.949	-5.556	24.181	1.00	29.23	O
HETATM 1162	O	HOH	73	41.717	10.288	-5.115	1.00	33.72	O
HETATM 1163	O	HOH	74	12.169	5.837	-3.570	1.00	24.16	O
HETATM 1164	O	HOH	75	2.244	4.555	29.490	1.00	39.91	O
HETATM 1165	O	HOH	76	0.059	5.703	10.311	1.00	48.55	O
HETATM 1166	O	HOH	77	32.789	10.606	-6.483	1.00	31.36	O
HETATM 1167	O	HOH	78	27.799	8.831	11.991	1.00	33.91	O
HETATM 1168	O	HOH	79	20.619	18.277	6.701	1.00	32.09	O
HETATM 1169	O	HOH	80	25.652	7.215	9.663	1.00	38.86	O
HETATM 1170	O	HOH	81	1.526	1.836	12.374	1.00	25.84	O
HETATM 1171	O	HOH	82	12.010	9.005	31.789	1.00	32.35	O
HETATM 1172	O	HOH	83	25.188	8.036	4.853	1.00	28.40	O
HETATM 1173	O	HOH	84	10.497	13.441	8.912	1.00	26.31	O
HETATM 1174	O	HOH	85	36.500	9.632	-1.457	1.00	40.81	O
HETATM 1175	O	HOH	86	9.106	-4.755	13.029	1.00	31.93	O
HETATM 1176	O	HOH	87	17.728	-8.863	19.315	1.00	31.03	O
HETATM 1177	O	HOH	88	26.732	22.250	0.910	1.00	45.99	O
HETATM 1178	O	HOH	89	19.007	9.578	12.411	1.00	31.70	O
HETATM 1179	O	HOH	90	36.640	-1.634	0.000	0.50	35.72	O
HETATM 1180	O	HOH	91	27.945	-8.855	6.704	1.00	27.71	O
HETATM 1181	O	HOH	92	27.290	-4.224	23.430	1.00	33.66	O
HETATM 1182	O	HOH	93	0.852	2.661	10.018	1.00	39.25	O
HETATM 1183	O	HOH	94	29.561	-4.347	13.985	1.00	34.30	O
HETATM 1184	O	HOH	95	30.094	16.920	-1.095	1.00	25.92	O
HETATM 1185	O	HOH	96	14.432	-7.053	22.743	1.00	48.00	O
HETATM 1186	O	HOH	97	16.001	-9.859	15.798	1.00	32.71	O
HETATM 1187	O	HOH	98	31.037	2.111	10.563	1.00	25.01	O
HETATM 1188	O	HOH	99	19.844	19.030	4.227	1.00	26.82	O
HETATM 1189	O	HOH	100	33.487	-0.253	3.213	1.00	46.21	O
HETATM 1190	O	HOH	101	3.151	8.064	24.674	1.00	28.98	O
HETATM 1191	O	HOH	102	20.657	10.741	7.096	1.00	25.94	O
HETATM 1192	O	HOH	103	35.056	10.760	-9.064	1.00	36.13	O
HETATM 1193	O	HOH	104	34.645	11.388	-2.210	1.00	29.93	O
HETATM 1194	O	HOH	105	29.390	8.304	17.740	1.00	46.26	O
HETATM 1195	O	HOH	106	9.849	-7.913	6.749	1.00	38.38	O
HETATM 1196	O	HOH	107	12.530	17.194	10.477	1.00	25.13	O
HETATM 1197	O	HOH	108	12.776	-7.766	24.984	1.00	34.76	O
HETATM 1198	O	HOH	109	5.946	-1.655	8.709	1.00	35.09	O
HETATM 1199	O	HOH	110	25.815	-8.638	17.900	1.00	39.44	O
HETATM 1200	O	HOH	111	11.650	-1.476	29.391	1.00	40.14	O
HETATM 1201	O	HOH	112	11.538	13.299	24.289	1.00	40.32	O

122/137

Forb. Fig 3E

HETATM	1202	O	HOH	114	10.625	11.226	17.906	1.00	28.23		O
HETATM	1203	O	HOH	115	4.475	-3.111	18.739	1.00	29.24		O
HETATM	1204	O	HOH	116	6.824	-4.822	27.218	1.00	38.49		O
HETATM	1205	O	HOH	117	8.466	-10.680	7.005	1.00	28.76		O
HETATM	1206	O	HOH	118	27.161	10.840	28.406	1.00	40.82		O
HETATM	1207	O	HOH	119	27.356	7.526	7.010	1.00	35.80		O
HETATM	1208	O	HOH	120	13.015	-10.947	11.161	1.00	40.66		O
HETATM	1209	O	HOH	121	33.416	-2.709	6.360	1.00	34.94		O
HETATM	1210	O	HOH	122	36.765	-7.518	3.388	1.00	41.17		O
HETATM	1211	O	HOH	123	3.206	10.740	20.736	1.00	44.36		O
HETATM	1212	O	HOH	124	20.015	12.579	15.843	1.00	48.50		O
HETATM	1213	O	HOH	125	33.413	14.245	-2.275	1.00	34.55		O
HETATM	1214	O	HOH	126	24.999	8.016	17.631	1.00	35.84		O
HETATM	1215	O	HOH	127	29.966	2.225	12.815	1.00	36.62		O
HETATM	1216	O	HOH	128	-0.573	0.978	13.535	1.00	25.81		O
HETATM	1217	O	HOH	129	32.149	4.239	-13.369	1.00	33.89		O
HETATM	1218	O	HOH	130	28.146	-2.577	12.367	1.00	27.68		O
HETATM	1219	O	HOH	131	8.203	11.497	0.091	1.00	40.90		O
HETATM	1220	O	HOH	132	38.820	11.045	-2.444	1.00	40.71		O
HETATM	1221	O	HOH	133	24.657	11.285	-6.282	1.00	32.54		O
HETATM	1222	O	HOH	134	27.759	7.260	21.692	1.00	38.51		O
HETATM	1223	O	HOH	135	33.198	-4.534	-3.082	1.00	34.92		O
HETATM	1224	O	HOH	136	31.186	5.253	20.561	1.00	51.14		O
HETATM	1225	O	HOH	137	30.398	-4.326	-4.393	1.00	41.59		O
HETATM	1226	O	HOH	138	33.231	11.894	-0.175	1.00	29.13		O
HETATM	1227	O	HOH	139	12.022	13.818	20.258	1.00	32.90		O
HETATM	1228	O	HOH	140	28.195	-8.407	10.513	1.00	32.85		O
HETATM	1229	O	HOH	141	19.465	12.078	19.578	1.00	36.82		O
HETATM	1230	O	HOH	142	13.047	-6.082	20.859	1.00	36.73		O
HETATM	1231	O	HOH	143	10.139	18.489	7.299	1.00	28.82		O
HETATM	1232	O	HOH	144	25.237	8.341	-7.887	1.00	22.82		O
HETATM	1233	O	HOH	145	9.728	7.673	32.251	1.00	45.77		O
HETATM	1234	O	HOH	146	16.266	10.860	29.263	1.00	47.99		O
HETATM	1235	O	HOH	147	29.275	3.380	8.882	1.00	28.86		O
HETATM	1236	O	HOH	148	17.341	-5.391	29.987	1.00	36.22		O
HETATM	1237	O	HOH	149	35.683	-4.548	-1.312	1.00	37.54		O
HETATM	1238	O	HOH	150	15.213	15.524	11.066	1.00	53.54		O
HETATM	1239	O	HOH	151	14.186	-10.678	6.982	1.00	44.75		O
HETATM	1240	O	HOH	152	5.768	3.154	29.633	1.00	33.70		O
CONECT	1043	1044	1045								
CONECT	1044	1043					</				

Übersetzung der Beschreibung der Figur 3E

Figur 3E

CHAPERON
KRISTALLSTRUKTUR DER TPR2A-DOMAENE VON HOP IM KOMPLEX MIT DEM HSP90 PEPTID MEEVD
MOL_ID:1;
MOLEKUEL TPR2A-DOMAENE VON HOP
KETTE A;
FRAGMENT: MITTLERE DOMAENE;
KONSTRUIERT: JA;
MOL_ID 2
MOLEKUEL: HSP90-PEPTID MEEVD
KETTE: B;
FRAGMENT: C-TERMINALES PENTAPEPTID
KONSTRUIERT: JA
MOL_ID: 1;
ORGANISMUS_WISSENSCHAFTLICH: HOMO SAPIENS;
ORGANISMUS_GEBRAEUCHLICH: MENSCH
EXPRESSIONS_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI
EXPRESSIONS_SYSTEM_GEMEIN: BAKTERIEN
EXPRESSIONS_SYSTEM_PLASMID PPRO-EX-HTA
MOL_ID2:
SYNTHETISCH: JA
ANDERE EINZELHEITEN: DIESE SEQUENZ KOMMT NATUERLICHERWEISE IN MENSCHEN VOR
HOP, TPR-DOMAENE, PEPTID-KOMPLEX, HELIKALER REPEAT, HSP90, PROTEIN-BINDEND
ROENTGENBEUGUNG
C. SCHEUFLE, A. BRINKER, F.U. HARTL, I.MOAREFI
KRISTALLSTRUKTUR DER TPR1-DOMAENE VON HOP IM KOMPLEX MIT EINEM HSP90 PEPTID
MEEVD ZUR VEROEFFENTLICHUNG VORGESEHEN

AUFLOESUNG 1,9Å

VERFEINERUNG

PROGRAMM: CNS1

AUTOREN: BRUNGER,ADAMS.....

VERFEINERUNGSZIEL: ENGH UND HUBER

IN DER VERFEINERUNG EINGESETZTE DATEN

OBERER AUFLOESUNGSBEREICH 1,9Å

UNTERER AUFLOESUNGSBEREICH 9,93Å

AUSSCHLUSSKRITERIUM FUEER DIE DATEN (SIGMA(F)): KEINES

VOLLSTAENDIGKEIT (ARBEITS UND TEST) 97,5%

ANZAHL DER REFLEXE: 10220

FIT DER IN DER VERFEINERUNG EINGESETZTEN DATEN

KREUZVALIDIERUNGSMETHODE: DURCHGEHEND

WAHL DES TESTDATENSATZES FUEER FREIEN R WERT: ZUFAELLIG

R WERT (ARBEITSSATZ): 18,1%

FREIER R WERT 0,219

GROESSE DES TESTDATENSATZES FUEER FREIEN R WERT: 9,8%

ANZAHL DER REFLEXE IM TESTDATENSATZ: 1003

GESCHAETZTER FEHLER DES FREIEN R WERTS: 0,007%

FIT IN DER HOECHSTEN AUFLOESUNGSSCHALE:

ANZAHL DER SCHALEN GESAMT: 6

HOECHSTE AUFLOESUNGSSCHALE: 1,9Å

NIEDRIGSTE AUFLOESUNGSSCHALE: 2,02Å

VOLLSTAENDIGKEIT (FREIE UND ARBEITS) 93,8%

ANZAHL DER REFLEXE IN DER SCHALE: 1453

R WERT (ARBEIT) 0,222

Fortsetzung Fig. 3E

FREIER R WERT: 0,2940
GROSSE DES TESTSATZES: 9,9%
ANZAHL DER REFLEXE IM TESTSET: 160
GESCHAETZTER FEHLER DES FREIEN R WERTS IN DER SCHALE: 0,023

ANZAHL DER NICHT WASSERSTOFF ATOME BEI DER VERFEINERUNG
PROTEINATOME: 1086
NUKLEINSAEUREATOME: 0
HETEROATOME: 1
SOLVENSATOME: 151

B WERTE
AUS DEM WILSON PLOT 15,3 Å**2
DURCHSCHNITTLICHER TEMPERATURWERT: 19,2 Å**2
ANISOTROPER TEMPERATURWERT UEBER ALLES
B11 (Å**2): 1,96
B22 (Å**2): 3,43
B33 (Å**2): -5,39
B12 (Å**2): 0
B13 (Å**2): 0,46
B23 (Å**2): 0

GESCHAETZTER KOORDINATENFEHLER
ESD (GESCHAETZTE STANDARDABWEICHUNG) AUS LUZATTI-PLOT: 0,19 Å
ESD AUS SIGMA: 0,12 Å
UNTERE AUFLÖSUNGSGRENZE: 5 Å

KREUZVALIDIERTER GESCHAETZTER KOORDINATENFEHLER
ESD AUS C-V LUZATTI-PLOT: 0,23 Å**2
ESD AUS C-VSIGMA: 0,17 Å**2

RMS ABWEICHUNGEN VON DEN IDEALEN WERTEN
BINDUNGS-LÄNGEN: 0,008 Å
BINDUNGSWINKEL: 1,2 GRAD
DIEDERWINKEL: 17,8 GRAD
IMPROPER WINKEL: 0,77 GRAD

ISOTROPISCHES THERMISCHES MODELL: RESTRAINED

ISOTROPE RESTRAINTS DER TEMPERATUREAKTOREN
HAUPTKETTENBINDUNGEN: 1,18 Å**2; 1,5 SIGMA
HAUPTKETTENWINKEL: 1,81 Å**2; 2 SIGMA
SEITEKETTENBINDUNGEN: 1,92 Å**2; 2 SIGMA
SEITENKETTENWINKEL: 2,98 Å**2; 2,5 SIGMA

MASSENSOLVES MODELLIERUNG
BENUTZTE METHODE: FLACHES MODELL
KSOL: 0,42
BSOL: 47,21

NCS MODELL: KEINES

NCS RESTRAINTS: KEINE

PARAMETER DATEI 1: PROTEIN_REP.PA
PARAMETER DATEI 2: WATER_REP.PARA
PARAMETER DATEI 3: ION.PARAM

Fortsetzung Fig. 3E

PARAMETER DATEI 4: CAPPING.PARAM

TOPOLOGIEDATEI 1: PROTEIN.TOP
TOPOLOGIEDATEI 2: ION.TOP
TOPOLOGIEDATEI 3: CAPPING.TOP
TOPOLOGIEDATEI 4: NULL

WEITERE BEMERKUNGEN ZUR VERFEINERUNG: KEINE

1ELR IST MIT FORMAT V.2.3, 09-JULI-1998 KONFORM

DIESER EINTRAG WURDE VOM RCSB AM 21-MAR-2000 PROZESSIERT.
DER RCSB KODE IST RCSB010709

DETAILS DES EXPERIMENTS
ART DES EXPERIMENTS: ROENTGENBEUGUNG
DATUM DER DATENSAMMLUNG: 10.5.1999
TEMPERATUR: 100K
PH: 8.5
ANZAHL DER VERWENDETEN KRISTALLE: 1

SYNCHROTRON: JA
STRAHLENQUELLE: ESRF
BEAMLINE: ID14-3
ROENTGENGENERATOR: KEINER
MONOCHROMATISCH
WELLENLAENGE: 0,9402Å
KEIN MONOCHROMATOR
KEINE OPTIK

DETEKTORART: CCD
HERSTELLERE: MARRESEARCH
PROGRAMM ZUR INTEGRATION DER INTENSITAETEN: MAR
SKALIERUNGSPROGRAMM: XDS

ANZAHL DER EINZIGARTIGEN REFLEXE: K/A
OBERES AUFLÖSUNGSLIMIT: 1,9Å
UNTERES: 15,0Å
AUSSCHLUSSKRITERIEN (SIGMA(I)): 0,0

UEBER ALLES
VOLLSTÄNDIGKEIT: 97,1%
REDUNDANZ DER DATEN: 0,0
R MERGE (I): 0,038
R SYM (I): KEINER
<I/SIGMA(I)> FÜR DEN DATENSATZ: 22,8

IN DER HÖCHSTEN AUFLÖSUNGSSCHALE
OBERE GRENZE: 1,9Å
UNTERE GRENZE: 1,95Å
VOLLSTÄNDIGKEIT DIESER SCHALE: 91,7%
REDUNDANZ IN DIESER SCHALE: 0
R MERGE IN DIESER SCHALE: 0,068
R SYM IN DIESER SCHALE: KEINER
<I/SIGMA(I)> FÜR DIESE SCHALE: KEINE

BEUGUNGS PROTOKOLL: EINZELNE WELLENLAENGE
METHODE DER STRUKTURBESTIMMUNG: KEINE
VERWENDETES PROGRAMM: MLPHARE
AUSGANGSMODELL: KEINES

Fortsetzung Fig. 3E

ANMERKUNG: KEINE

KRISTALL

LÖSUNGSMITTEL GEHALT: VS (%) : NULL

MATTHEWS KOEFFIZIENT: VM ($\text{\AA}^3/\text{DA}$) : NULL

KRISTALLISATIONSBEDINGUNGEN: PEG MME 2000, TRIS, NICKEL CHLORID, XYLIT

KRISTALLSYMMETRIE

SYMMETRIOPERATOREN FUER RAUMGRUPPE C 121

...

wobei NNN → OPERATIONSNUMMER

MMM → TRANSLATIONSVEKTOR

KRISTALLOGRAPHISCHE SYMMETRIETRANSFORMATION

DIE FOLGENDEN TRANSFORMATIONEN GELTEN FÜR ATOM/HETATM

....

BIOMOLEKUEL 1

DIESER EINTRAG BEINHÄLTET DIE KRISTALLOGRAPHISCHE ASYMMETRISCHE EINHEIT WELCHE AUS ZWEI KETTEN BESTEHT. ANMERKUNG 350 ENTHÄLT DIE ANWEISUNGEN ÜBER DIE ZUSAMMENSETZUNG DER BIOLOGISCH RELEVANTEN MOLEKÜLE:

(350) ERZEUGUNG DES BIOMOLEKUELS

KOORDINATEN FÜR EIN MULTIMER WELCHES DEN BEKANNTEN OLIGOMERISIERUNGSZUSTAND REPRÄSENTIERT

DAS MOLEKÜL KANN DURCH DIE IM FOLGENDEN ANGEgebenEN BIOMT TRANSFORMATIONEN ERZEUGT WERDEN. SOWOHL DIE KRISTALLOGRAPHISCHEN ALS AUCH DIE NICHT-KRISTALLOGRAPHISCHEN OPERATIONEN SIND ANGEgeben.

BIOMOLEKUEL: 1

FOLGENDES AUF KETTEN A UND B ANWENDEN:

...

SPEZIELLE POSITIONEN

FOLGENDE ATOME SIND HÖCHSTENS 0,15Å VON EINEM SYMMETRIEVERWANDTEN ENTFERNT UND ES WIRD DAHER ANGENOMMEN, DASS SIE AUF EINER SPEZIELLEN POSITION LIEGEN:

HOH 90 LIEGT AUF EINER SPEZIELLEN POSITION

FEHLENDE RESTE

FOLGENDE RESTE KONNTEN NICHT EXPERIMENTELL LOKALISIERT WERDEN. (M=MODELL NUMMER; RES=NAME DES RESTES; C=KETTE; SSSEQ=POSITION IN DER SEQUENZ; I=INSERTIONSKODE)

M RES C SSSEQI

GLU A 350

ARG A 351

LEU A 352

FEHLENDE ATOME

FOLGENDE RESTE WEISEN FEHLENDE ATOME AUF. (M=MODELL NUMMER; RES=NAME DES RESTES; C=KETTE; SSSEQ=POSITION IN DER SEQUENZ; I=INSERTIONSKODE)

M RES CSSEQI ATOMS

...

Fortsetzung Fig. 3E

GEOMETRIE UND STEREOCHEMIE
UNTERTHEMA: LAENGE DER KOVALENTEN BINDUNGEN

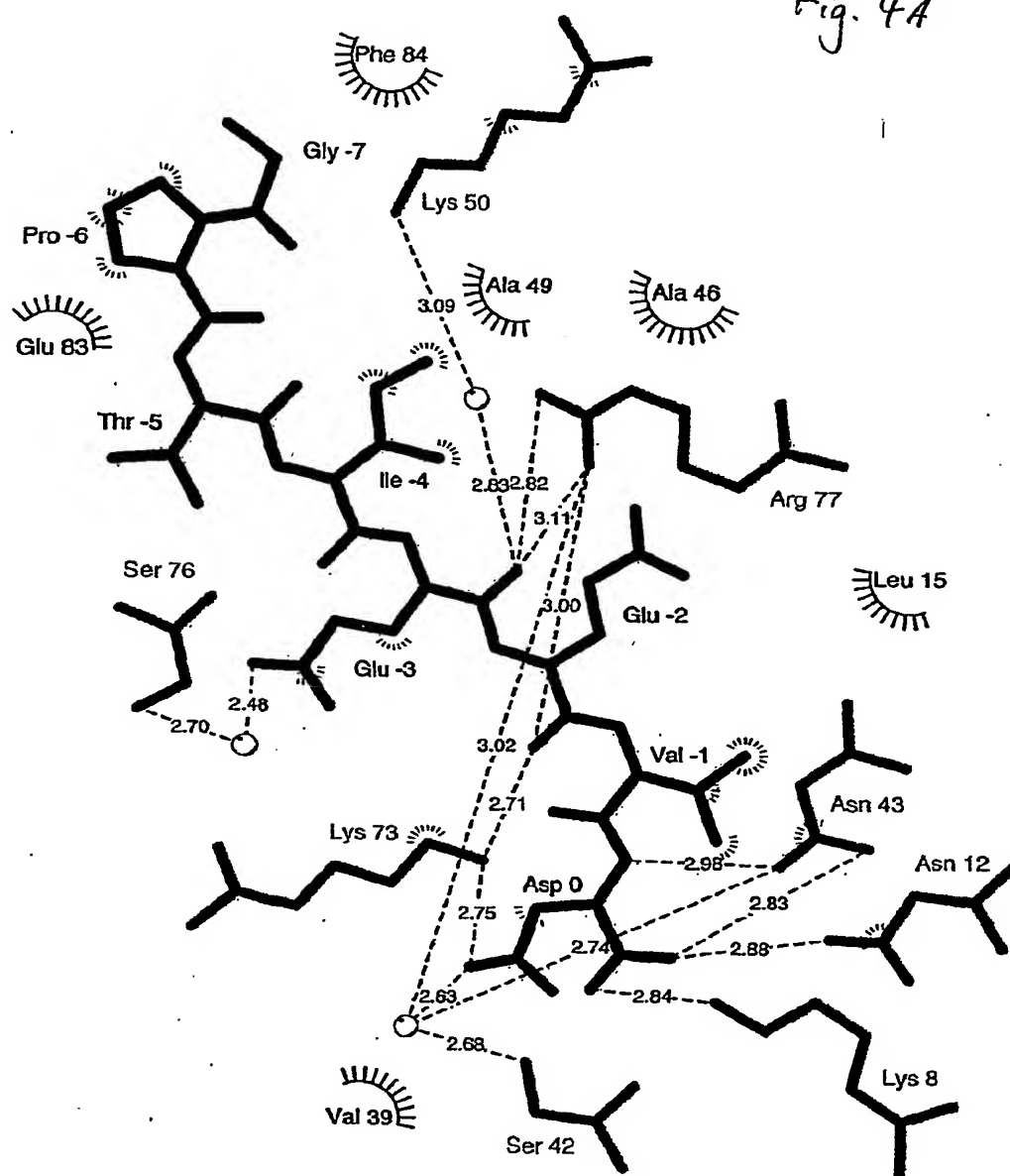
DIE STEREOCHEMISCHEN PARAMETER DER FOLGENDEN RESTE HABEN WERTE, DIE VON DEN ERWARTUNGSWERTEN UM MEHR ALS 6*RMSD ABWEICHEN. (M=MODELL NUMMER; RES=NAME DES RESTES; C=KETTE; SSSEQ=POSITION IN DER SEQUENZ; I=INSERTIONSKODE)

STANDARD TABELLE
FORMAT ...

ERWARTETE WERTE: ENGH UND HUBER, 1991

...

Fig. 4A





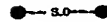


-  Ligand bond
-  Non-ligand bond
-  Hydrogen bond and its length
-  His 53 Non-ligand residues involved in hydrophobic contact(s)
-  Corresponding atoms involved in hydrophobic contact(s)

Fig. 4B

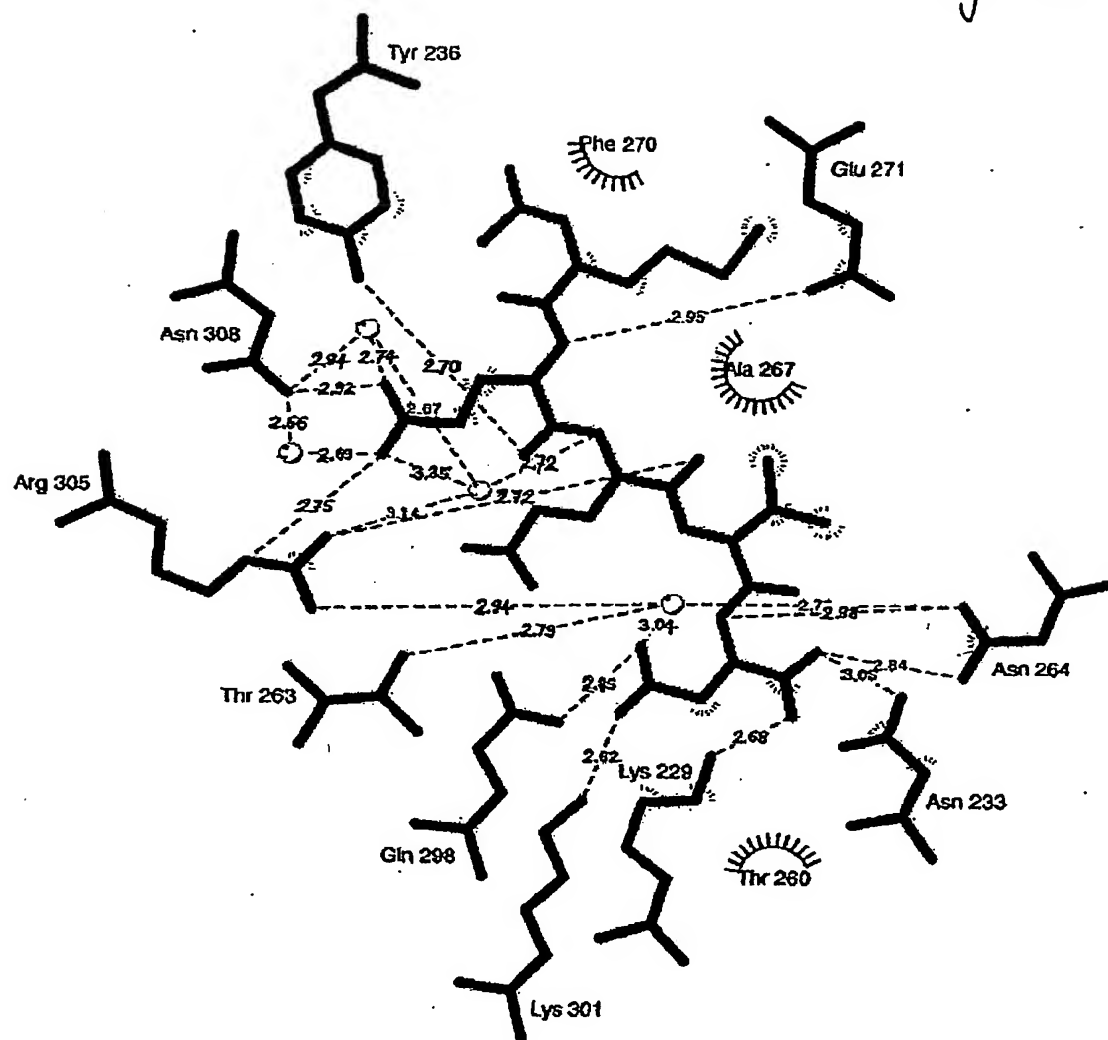
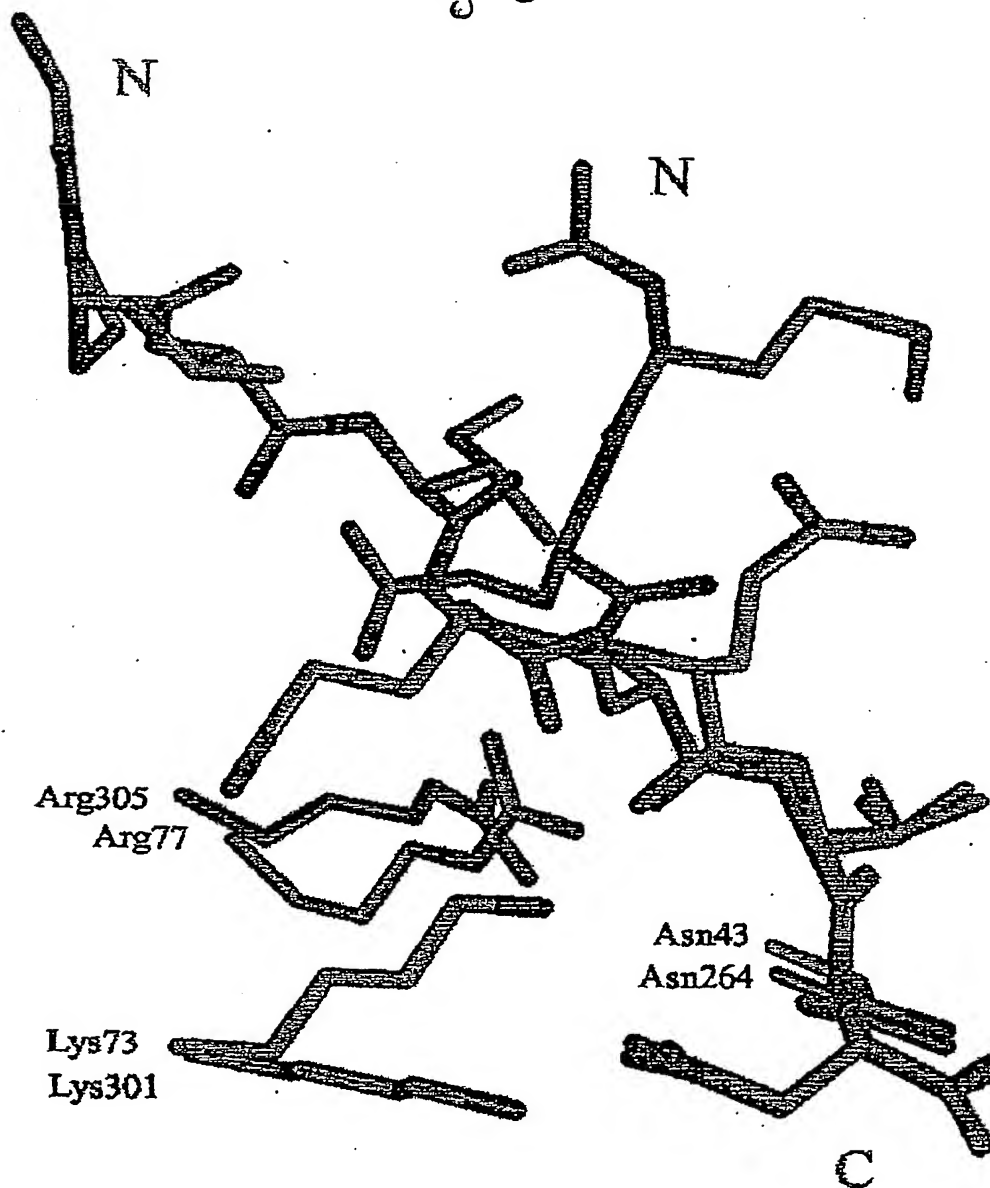


Fig. 5



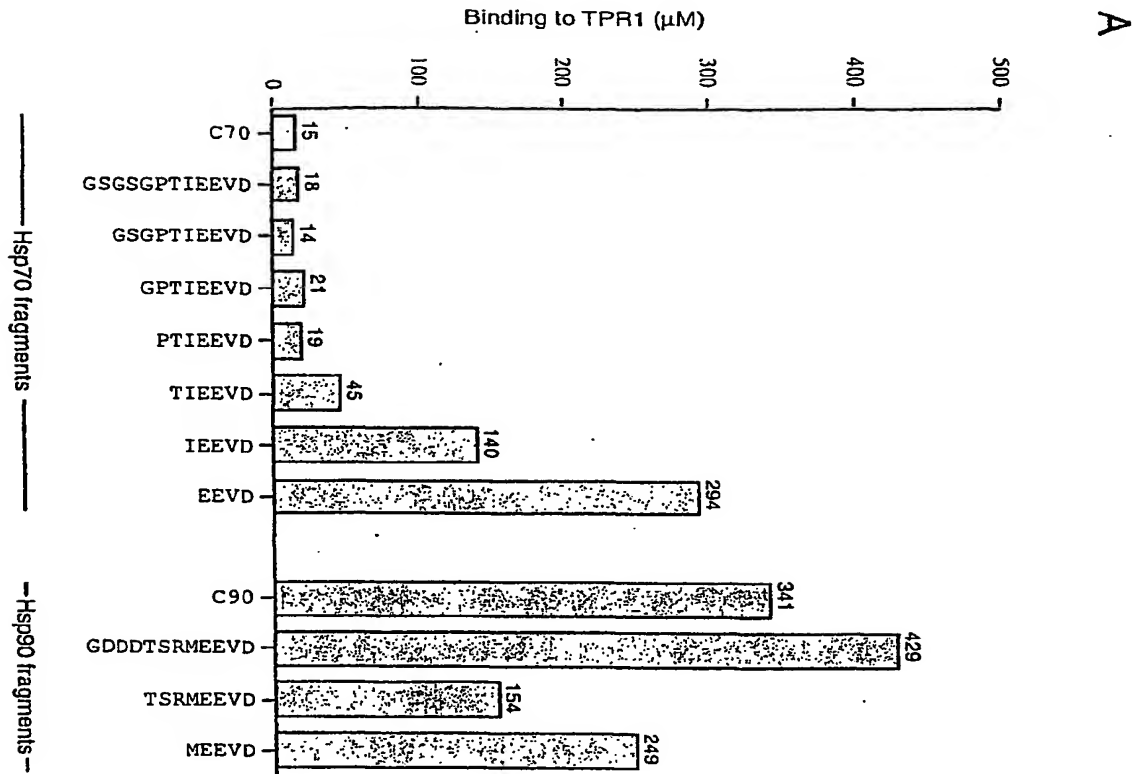


FIG. 6

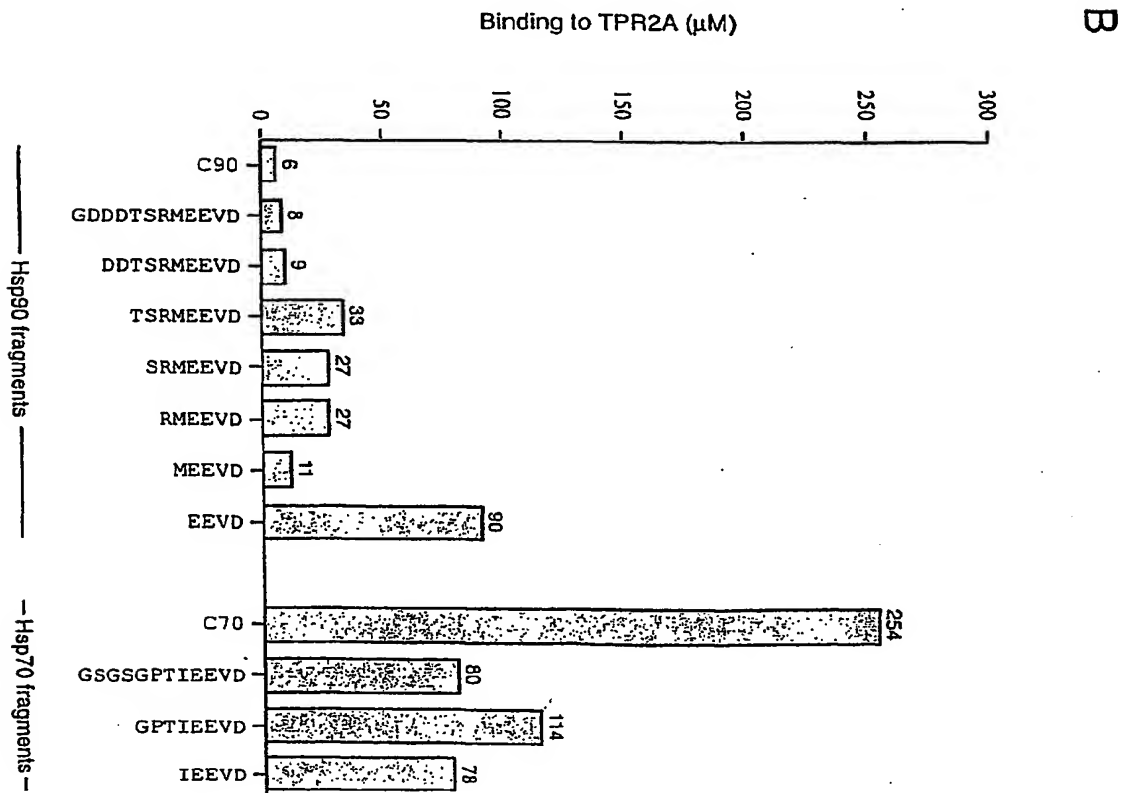


FIG. 7

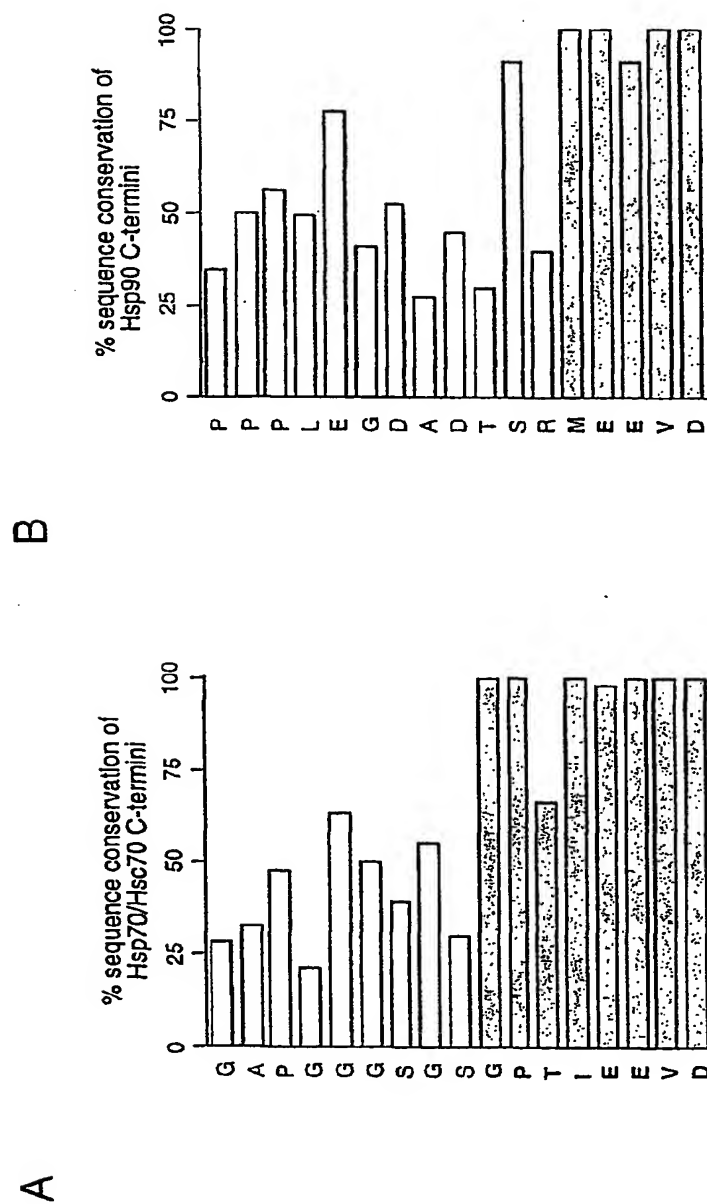
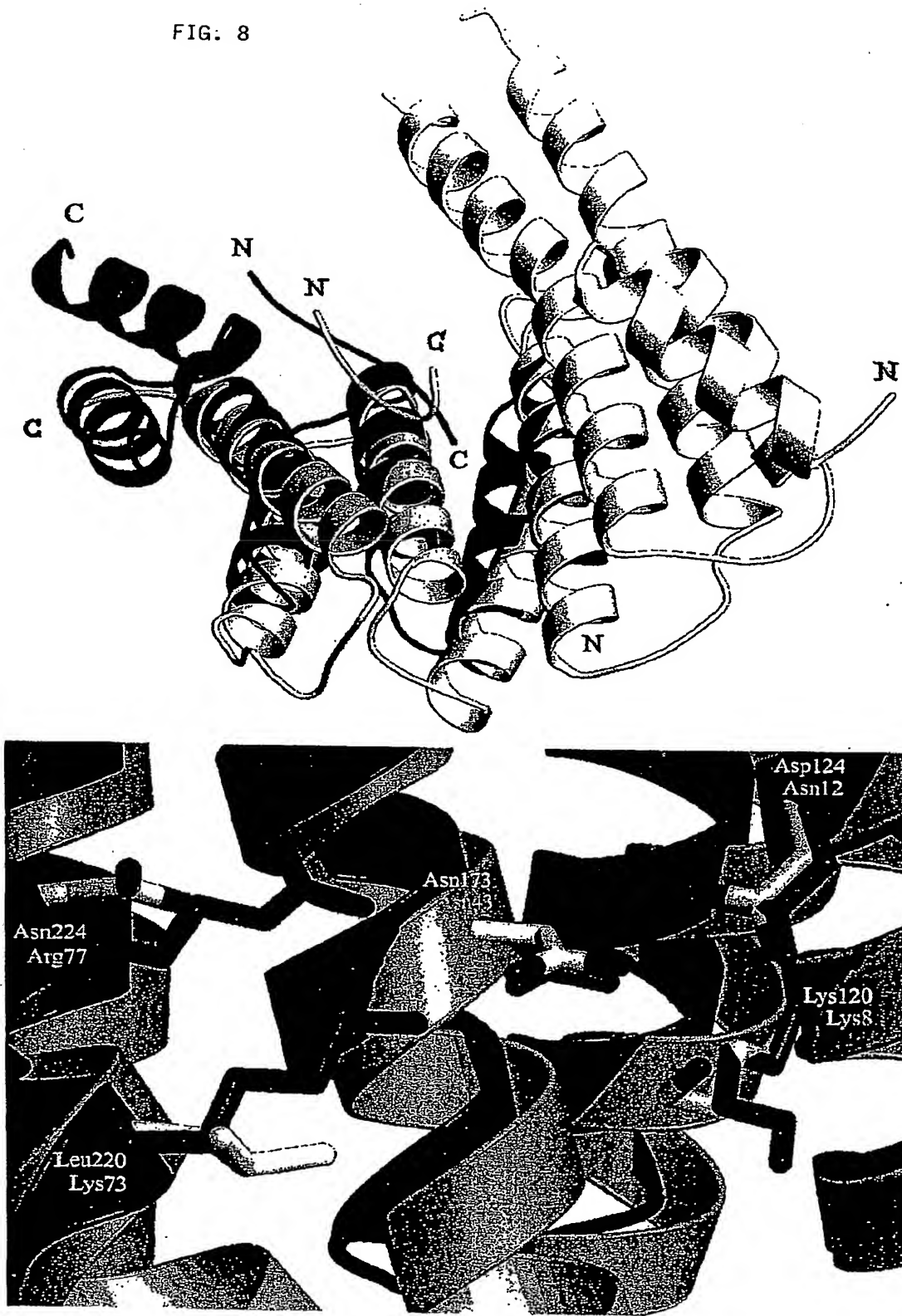


FIG. 8



Enlarge A-1

Figure 9 (not in the manuscript)

Affinities of full length proteins and individual domains as measured by surface plasmon resonance.

1. The interaction of Hsp90 with Hop can be described by the interaction of the last five residues of Hsp90 with the TPR2a domain of Hop.

Hsp90 vs Hop:	1 μ M (+/- 0.4 μ M)
Hsp90 vs TPR2a:	7 μ M (+/- 4 μ M)

C90 vs Hop	3 μ M (+/- 2 μ M)
C90 vs TPR2a	5 μ M (+/- 1 μ M)

(5mer peptide from Hsp90 C-terminus):

MEEVD vs TPR2a	11 μ M
----------------	------------

2. The interaction of Hsp70 with Hop can be described by the interaction of the last seven residues of Hsp70 with the TPR1 domain of Hop.

Hsp70 vs Hop:	2 μ M (+/- 1 μ M)
Hsp70 vs TPR1:	18 μ M (+/- 8 μ M)

C70 vs Hop	2 μ M (+/- 1 μ M)
C70 vs TPR1	22 μ M (+/- 2 μ M)

(7mer peptide from Hsp90 C-terminus):

PTIEEVD vs TPR2a	17 μ M
------------------	------------

Figure A2

IC ₅₀ [μM]	
Hsp70 vs. TPR I	
Hsp70 peptides	Hsp90 peptides
EEVD 221 (41)	MEEVD 171 (26)
IEVD 104 (30)	
TEEVD 30 (10)	
PTIEVD 17 (2)	
GPTIEVD 17 (3)	TSRMEEVD 157 (4)
GSGPTIEVD 13 (1)	
GSGSGPTIEVD 15 (3)	GDDDTSRMEEVD 163 (32)
Hsp90 vs. TPR IIA	
Hsp70 peptides	Hsp90 peptides
EEVD 89 (3)	
IEVD 88 (13)	MEEVD 11 (1)
	RMEEVD 43 (1)
	SRMEEVD 44 (1)
GPTIEVD 131 (14)	TSRMEEVD 38 (3)
	DDTSRMEEVD 13 (1)
GSGSGPTIEVD 117 (14)	GDDDTSRMEEVD 8 (1)

Figure 10 (not in the manuscript)

Affinities of Hsp peptides for TPR domains of Hop as measured by surface plasmon resonance.

Top part: IC₅₀ binding constants for the binding of Hsp70 and Hsp90 peptides to TPR1 of Hop. The data show that Hsp70 peptides bind with much higher affinity to TPR1 than Hsp90 peptides.

Lower part: IC₅₀ binding constants for the binding of Hsp70 and Hsp90 peptides to TPR2a of Hop. The data show that Hsp90 peptides bind with much higher affinity to TPR2a than Hsp70 peptides.

Anlage A3'

K_D [μ M]			
TPR I			
Hsp70 peptides		Hsp90 peptides	
EEVD	294 (6)		
IEVD	140 (7)	MEEVD	249 (9)
TIEVD	45 (5)		
PTIEVD	19 (0)		
GPTIEVD	27 (0)	TSRMEEVD	154 (5)
CSGPTIEVD	14 (0)		
CSGSGPTIEVD	18 (0)	GDDDTSRMEEVD	429 (10)
C70	15 (0)	C90	341 (13)
TPR II A			
Hsp70 peptides		Hsp90 peptides	
EEVD	90 (8)		
IEVD	78 (2)	MEEVD	11 (0)
		RNIEVD	27 (0)
		SRMEEVD	27 (1)
GPTIEVD	114 (4)	TSRMEEVD	33 (1)
		DDTSRMEEVD	9 (0)
CSGSGPTIEVD	80 (3)	GDDDTSRMEEVD	8 (0)
C70	254 (5)	C90	6 (0)

Figure 11 (not in the manuscript)

Affinities of Hsp peptides for TPR domains of Hop as measured by isothermal calorimetry.

This data set demonstrates the same results as shown in Figure 10 by a different technique. The advantage here is that receptor ligand interactions can be measured in solution without immobilization artefacts.

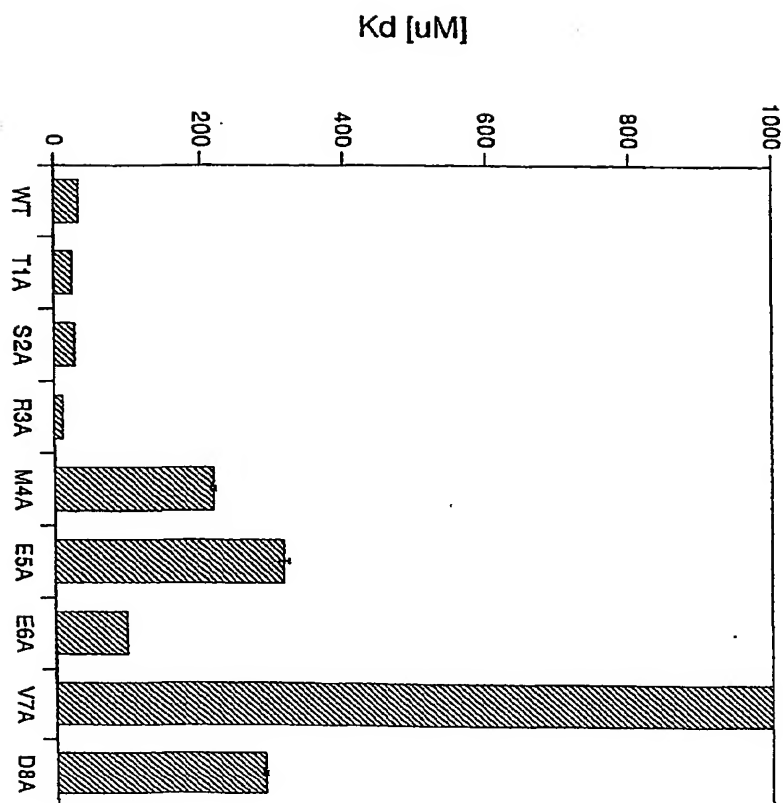
Top part: Affinities for the binding of Hsp70 and Hsp90 peptides to TPR I of Hop. The data show that Hsp70 peptides bind with much higher affinity to TPR I than Hsp90 peptides.

Lower part: Affinities for the binding of Hsp70 and Hsp90 peptides to TPR2a of Hop. The data show that Hsp90 peptides bind with much higher affinity to TPR2a than Hsp70 peptides.

Anlage A4

Figure 12 (not in the manuscript)

Alanine scan of the Interaction of TPR2a with Hsp90 peptides.
This experiment is the same as in figure 7 of the manuscript but
at this time the importance of specific side chains of Hsp90 peptides is
analyzed. The results demonstrate that only the last five amino acids are
required for binding and that there are differences in the contribution of
individual side chains when compared to the Hsp70 case.



SEQUENZPROTOKOLL

<110> Max-Planck-Gesellschaft e. V.

<120> TPR-HITZESCHOCKPROTEIN

<130> M1984-001-DEPDESk

<140> 100 18 335.2

<141> 2000-04-13

<160> 30

<170> PatentIn Ver. 2.1

<210> 1

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TPR1 in Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 4 der TPR1-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 1

Val	Asn	Glu	Leu	Lys	Glu	Lys	Gly	Asn	Lys	Ala	Leu	Ser	Val	Gly	Asn
1				5					10					15	

Ile	Asp	Asp	Ala	Leu	Gln	Cys	Tyr	Ser	Glu	Ala	Ile	Lys	Leu	Asp	Pro
			20					25					30		

His	Asn	His	Val	Leu	Tyr	Ser	Asn	Arg	Ser	Ala	Ala	Tyr	Ala	Lys	Lys
		35					40					45			

Gly	Asp	Tyr	Gln	Lys	Ala	Tyr	Glu	Asp	Gly	Cys	Lys	Thr	Val	Asp	Leu
	50					55					60				

Lys	Pro	Asp	Trp	Gly	Lys	Gly	Tyr	Ser	Arg	Lys	Ala	Ala	Ala	Leu	Glu
65					70					75					80

Phe	Leu	Asn	Arg	Phe	Glu	Glu	Ala	Lys	Arg	Thr	Tyr	Glu	Glu	Gly	Leu
			85						90					95	

Lys	His	Glu	Ala	Asn	Asn	Pro	Gln	Leu	Lys	Glu	Gly	Leu	Gln	Asn	Met
			100					105					110		

Glu	Ala	Arg	Leu	Ala	Glu	Arg	Lys	Phe	Met
			115				120		

<210> 2

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz CHIP in Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 26

der CHIP-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 2

Ala	Gln	Glu	Leu	Lys	Glu	Gln	Gly	Asn	Arg	Leu	Phe	Val	Gly	Arg	Lys
1				5					10					15	

Tyr	Pro	Glu	Ala	Ala	Ala	Cys	Tyr	Gly	Arg	Val	Ile	Thr	Arg	Asn	Pro
		20						25					30		

Leu	Val	Ala	Val	Tyr	Tyr	Thr	Asn	Arg	Ala	Leu	Cys	Tyr	Leu	Lys	Met
		35					40					45			

Gln	Gln	His	Glu	Gln	Ala	Leu	Ala	Asp	Cys	Arg	Arg	Ala	Leu	Glu	Leu
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

50	55	60
Asp Gly Gln Ser Val Lys Ala His Phe Phe Leu Gly Gln Cys Gln Leu		
65	70	75
80		
Glu Met Glu Ser Tyr Asp Glu Ala Ile Ala Asn Leu Gln Arg Ala Tyr		
85	90	95
Ser Leu Ala Lys Glu Gln Arg Leu Asn Phe Gly Asp Asp Ile Pro Ser		
100	105	110
115	120	
Ala Leu Arg Ile Ala Lys Lys Lys Arg Trp		

<210> 3

<211> 128

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TPR2A in Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 225 der TPR2A-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1) .. (12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17) .. (29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35) .. (46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51) .. (63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (76)..(87)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (92)..(104)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (111)..(123)

<223> Helix C

<400> 3

Ala	Leu	Lys	Glu	Lys	Glu	Leu	Gly	Asn	Asp	Ala	Tyr	Lys	Lys	Lys	Asp
1				5					10					15	

Phe	Asp	Thr	Ala	Leu	Lys	His	Tyr	Asp	Lys	Ala	Lys	Glu	Leu	Asp	Pro
			20					25					30		

Thr	Asn	Met	Thr	Tyr	Ile	Thr	Asn	Gln	Ala	Ala	Val	Tyr	Phe	Glu	Lys
		35				40						45			

Gly	Asp	Tyr	Asn	Lys	Cys	Arg	Glu	Leu	Cys	Glu	Lys	Ala	Ile	Glu	Val
	50				55					60					

Gly	Arg	Glu	Asn	Arg	Glu	Asp	Tyr	Arg	Gln	Ile	Ala	Lys	Ala	Tyr	Ala
65				70					75					80	

Arg	Ile	Gly	Asn	Ser	Tyr	Phe	Lys	Glu	Glu	Lys	Tyr	Lys	Asp	Ala	Ile
			85					90					95		

His	Phe	Tyr	Asn	Lys	Ser	Leu	Ala	Glu	His	Arg	Thr	Pro	Asp	Val	Leu
			100					105					110		

Lys	Lys	Cys	Gln	Gln	Ala	Glu	Lys	Ile	Leu	Lys	Glu	Gln	Glu	Arg	Leu
	115						120					125			

<210> 4

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TPR2B in Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 360 der TPR2B-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 4

Ala	Leu	Glu	Glu	Lys	Asn	Lys	Gly	Asn	Glu	Cys	Phe	Gln	Lys	Gly	Asp
1				5				10						15	

Tyr	Pro	Gln	Ala	Met	Lys	His	Tyr	Thr	Glu	Ala	Ile	Lys	Arg	Asn	Pro
			20				25						30		

Lys	Asp	Ala	Lys	Leu	Tyr	Ser	Asn	Arg	Ala	Ala	Cys	Tyr	Thr	Lys	Leu
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

35	40	45
Leu Glu Phe Gln Leu Ala Leu Lys Asp Cys Glu Glu Cys Ile Gln Leu		
50	55	60
Glu Pro Thr Phe Ile Lys Gly Tyr Thr Arg Lys Ala Ala Ala Leu Glu		
65	70	75 80
Ala Met Lys Asp Tyr Thr Lys Ala Met Asp Val Tyr Gln Lys Ala Leu		
85	90	95
Asp Leu Asp Ser Ser Cys Lys Glu Ala Ala Asp Gly Tyr Gln Arg Cys		
100	105	110
Met Met Ala Gln Tyr Asn Arg His Asp Ser		
115	120	

<210> 5

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz PP5 in Fig.3.
 Die erste Aminosäure der vorliegenden Sequenz
 entspricht der Aminosäure 28 der PP5-Sequenz in
 Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 5

Ala Glu Glu Leu Lys Thr Gln Ala Asn Asp Tyr Phe Lys Ala Lys Asp
 1 5 10 15

Tyr Glu Asn Ala Ile Lys Phe Tyr Ser Gln Ala Ile Glu Leu Asn Pro
 20 25 30

Ser Asn Ala Ile Tyr Tyr Gly Asn Arg Ser Leu Ala Tyr Leu Arg Thr
 35 40 45

Glu Cys Tyr Gly Tyr Ala Leu Gly Asp Ala Thr Arg Ala Ile Glu Leu
 50 55 60

Asp Lys Lys Tyr Ile Lys Gly Tyr Tyr Arg Arg Ala Ala Ser Asn Met
 65 70 75 80

Ala Leu Gly Lys Phe Arg Ala Ala Leu Arg Asp Tyr Glu Thr Val Val
 85 90 95

Lys Val Lys Pro His Asp Lys Asp Ala Lys Met Lys Tyr Gln Glu Cys
 100 105 110

Asn Lys Ile Val Lys Gln Lys Ala Phe Glu
 115 120

<210> 6

<211> 137

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz FKBP51 in Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 268 der FKBP51-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (50)..(61)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (66)..(78)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (84)..(95)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (100)..(112)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (120)..(132)

<223> Helix C

<400> 6

Ala	Ala	Ile	Val	Lys	Glu	Lys	Gly	Thr	Val	Tyr	Phe	Lys	Gly	Gly	Lys
1				5				10					15		

Tyr	Met	Gln	Ala	Val	Ile	Gln	Tyr	Gly	Lys	Ile	Val	Ser	Trp	Leu	Glu
		20					25						30		

Met	Glu	Tyr	Gly	Leu	Ser	Glu	Lys	Glu	Ser	Lys	Ala	Ser	Glu	Ser	Phe
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

35	40	45
Leu Leu Ala Ala Phe Leu Asn Leu Ala Met Cys Tyr Leu Lys Leu Arg		
50	55	60
Glu Tyr Thr Lys Ala Val Glu Cys Cys Asp Lys Ala Leu Gly Leu Asp		
65	70	75 80
Ser Ala Asn Glu Lys Gly Leu Tyr Arg Arg Gly Glu Ala Gln Leu Leu		
85	90	95
Met Asn Glu Phe Glu Ser Ala Lys Gly Asp Phe Glu Lys Val Leu Glu		
100	105	110
Val Asn Pro Gln Asn Lys Ala Ala Arg Leu Gln Ile Ser Met Cys Gln		
115	120	125
Lys Lys Ala Lys Glu His Asn Glu Arg		
130	135	

<210> 7
 <211> 137
 <212> PRT
 <213> Homo sapiens

<220>
 <223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz FKBP52 in
 Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
 genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 270
 der FKBP52-Sequenz in Fig.3.

<220>
 <221> HELIX
 <222> (1)..(12)
 <223> Helix 1A

<220>
 <221> HELIX
 <222> (17)..(29)
 <223> Helix 1B

<220>
 <221> HELIX
 <222> (50)..(61)
 <223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (66)..(78)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (84)..(95)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (100)..(112)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (120)..(132)

<223> Helix C

<400> 7

Ser Thr Ile Val Lys Glu Arg Gly Thr Val Tyr Phe Lys Glu Gly Lys
1 5 10 15

Tyr Lys Gln Ala Leu Leu Gln Tyr Lys Lys Ile Val Ser Trp Leu Glu
20 25 30

Tyr Glu Ser Ser Phe Ser Asn Glu Glu Ala Gln Lys Ala Gln Ala Leu
35 40 45

Arg Leu Ala Ser His Leu Asn Leu Ala Met Cys His Leu Lys Leu Gln
50 55 60

Ala Phe Ser Ala Ala Ile Glu Ser Cys Asn Lys Ala Leu Glu Leu Asp
65 70 75 80

Ser Asn Asn Glu Lys Gly Leu Phe Arg Arg Gly Glu Ala His Leu Ala
85 90 95

Val Asn Asp Phe Glu Leu Ala Arg Ala Asp Phe Gln Lys Val Leu Gln
100 105 110

Leu Tyr Pro Asn Asn Lys Ala Ala Lys Thr Gln Leu Ala Val Cys Gln
115 120 125

Gln Arg Ile Arg Arg Gln Leu Ala Arg
130 135

<210> 8
<211> 138
<212> PRT
<213> Homo sapiens

<220>
<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz CYP40 in
Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 223
in der CYP40-Sequenz in Fig.3.

<220>
<221> HELIX
<222> (1)..(12)
<223> Helix 1A

<220>
<221> HELIX
<222> (17)..(29)
<223> Helix 1B

<220>
<221> HELIX
<222> (51)..(62)
<223> Helix 2A

<220>
<221> HELIX
<222> (67)..(79)
<223> Helix 2B

<220>
<221> HELIX
<222> (85)..(96)
<223> Helix 3A

<220>
<221> HELIX
<222> (101)..(113)
<223> Helix 3B

<220>
<221> HELIX
<222> (121)..(133)
<223> Helix C

<400> 8
Thr Glu Asp Leu Lys Asn Ile Gly Asn Thr Phe Phe Lys Ser Gln Asn

1 5 10 15
 Trp Glu Met Ala Ile Lys Lys Tyr Ala Glu Val Leu Arg Tyr Val Asp
 20 25 30
 Ser Ser Lys Ala Val Ile Glu Thr Ala Asp Arg Ala Lys Leu Gln Pro
 35 40 45
 Ile Ala Leu Ser Cys Val Leu Asn Ile Gly Ala Cys Lys Leu Lys Met
 50 55 60
 Ser Asn Trp Gln Gly Ala Ile Asp Ser Cys Leu Glu Ala Leu Glu Leu
 65 70 75 80
 Asp Pro Ser Asn Thr Lys Ala Leu Tyr Arg Arg Ala Gln Gly Trp Gln
 85 90 95
 Gly Leu Lys Glu Tyr Asp Gln Ala Leu Ala Asp Leu Lys Lys Ala Gln
 100 105 110
 Gly Ile Ala Pro Glu Asp Lys Ala Ile Gln Ala Glu Leu Leu Lys Val
 115 120 125
 Lys Gln Lys Ile Lys Ala Gln Lys Asp Lys
 130 135

<210> 9

<211> 117

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TOM34 in
 Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
 genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 193
 der TOM34-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 9

Ala	Arg	Val	Leu	Lys	Glu	Glu	Gly	Asn	Glu	Leu	Val	Lys	Lys	Gly	Asn
1				5					10					15	

His	Lys	Lys	Ala	Ile	Glu	Lys	Tyr	Ser	Glu	Ser	Leu	Leu	Cys	Ser	Asn
			20					25					30		

Leu	Glu	Ser	Ala	Thr	Tyr	Ser	Asn	Arg	Ala	Leu	Cys	Tyr	Leu	Val	Leu
		35					40					45			

Lys	Gln	Tyr	Thr	Glu	Ala	Val	Lys	Asp	Cys	Thr	Glu	Ala	Leu	Lys	Leu
	50						55				60				

Asp	Gly	Lys	Asn	Val	Lys	Ala	Phe	Tyr	Arg	Arg	Ala	Gln	Ala	His	Lys
65					70				75					80	

Ala	Leu	Lys	Asp	Tyr	Lys	Ser	Ser	Phe	Ala	Asp	Ile	Ser	Asn	Leu	Leu
				85					90					95	

Gln	Ile	Glu	Pro	Arg	Asn	Gly	Pro	Ala	Gln	Lys	Leu	Arg	Gln	Glu	Val
		100						105					110		

Lys Gln Asn Leu His

115

<210> 10
<211> 121
<212> PRT
<213> Homo sapiens

<220>
<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TOM70 in
Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 136
der TOM70-Sequenz in Fig.3.

<220>
<221> HELIX
<222> (1)..(12)
<223> Helix 1A

<220>
<221> HELIX
<222> (17)..(29)
<223> Helix 1B

<220>
<221> HELIX
<222> (35)..(45)
<223> Helix 2A

<220>
<221> HELIX
<222> (50)..(62)
<223> Helix 2B

<220>
<221> HELIX
<222> (68)..(79)
<223> Helix 3A

<220>
<221> HELIX
<222> (84)..(96)
<223> Helix 3B

<220>
<221> HELIX
<222> (104)..(116)
<223> Helix C

<400> 10

Ala Ala Lys Leu Lys Glu Leu Gly Asn Lys Ala Tyr Gly Ser Lys Asp
 1 5 10 15

Phe Asn Lys Ala Ile Asp Leu Tyr Ser Lys Ala Ile Ile Cys Lys Pro
 20 25 30

Asp Pro Val Tyr Tyr Ser Asn Arg Ala Ala Cys His Asn Ala Leu Ala
 35 40 45

Gln Trp Glu Gln Val Val Ala Asp Thr Thr Ala Ala Leu Lys Leu Asp
 50 55 60

Pro His Tyr Val Lys Ala Leu Asn Arg Arg Ala Asn Ala Tyr Asp Gln
 65 70 75 80

Leu Ser Arg Tyr Arg His Ala Leu Leu Asp Phe Thr Ala Ser Cys Ile
 85 90 95

Ile Asp Gly Phe Arg Asn Glu Gln Ser Ala Gln Ala Val Glu Arg Leu
 100 105 110

Leu Lys Lys Phe Ala Glu Asn Lys Ala
 115 120

<210> 11

<211> 126

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz CNS1_sc in
 Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
 genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 83
 der CNS1_sc-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1) .. (12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17) .. (29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (39)..(50)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (55)..(67)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (73)..(84)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (89)..(101)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (109)..(121)

<223> Helix C

<400> 11

Ala	Glu	Asn	Phe	Lys	Lys	Gln	Gly	Asn	Glu	Leu	Tyr	Lys	Ala	Lys	Arg
1				5					10					15	

Phe	Lys	Asp	Ala	Arg	Glu	Leu	Tyr	Ser	Lys	Gly	Leu	Ala	Val	Glu	Cys
			20					25					30		

Glu	Asp	Lys	Ser	Ile	Asn	Glu	Ser	Leu	Tyr	Ala	Asn	Arg	Ala	Ala	Cys
	35						40					45			

Glu	Leu	Glu	Leu	Lys	Asn	Tyr	Arg	Arg	Cys	Ile	Glu	Asp	Cys	Ser	Lys
	50					55					60				

Ala	Leu	Thr	Ile	Asn	Pro	Lys	Asn	Val	Lys	Cys	Tyr	Tyr	Arg	Thr	Ser
65					70					75					80

Lys	Ala	Phe	Phe	Gln	Leu	Asn	Lys	Leu	Glu	Glu	Ala	Lys	Ser	Ala	Ala
				85					90					95	

Thr	Phe	Ala	Asn	Gln	Arg	Ile	Asp	Pro	Glu	Asn	Lys	Ser	Ile	Leu	Asn
			100					105					110		

Met	Leu	Ser	Val	Ile	Asp	Arg	Lys	Glu	Gln	Glu	Leu	Lys	Ala
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

115

120

125

<210> 12

<211> 127

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TTC1 in Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 116 der Sequenz TTC1 in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (40)..(51)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (56)..(68)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (74)..(85)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (90)..(102)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (110)..(122)

<223> Helix C

<400> 12

Ser Thr Arg Leu Lys Glu Glu Gly Asn Glu Gln Phe Lys Lys Gly Asp
 1 5 10 15

Tyr Ile Glu Ala Glu Ser Ser Tyr Ser Arg Ala Leu Glu Met Cys Pro
 20 25 30

Ser Cys Phe Gln Lys Glu Arg Ser Ile Leu Phe Ser Asn Arg Ala Ala
 35 40 45

Ala Arg Met Lys Gln Asp Lys Lys Glu Met Ala Ile Asn Asp Cys Ser
 50 55 60

Lys Ala Ile Gln Leu Asn Pro Ser Tyr Ile Arg Ala Ile Leu Arg Arg
 65 70 75 80

Ala Glu Leu Tyr Glu Lys Thr Asp Lys Leu Asp Glu Ala Leu Glu Asp
 85 90 95

Tyr Lys Ser Ile Leu Glu Lys Asp Pro Ser Ile His Gln Ala Arg Glu
 100 105 110

Ala Cys Met Arg Leu Pro Lys Gln Ile Glu Glu Arg Asn Glu Arg
 115 120 125

<210> 13

<211> 126

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TTC2 in
 Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
 genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 246
 der TTC2-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (39)..(50)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (55)..(67)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (73)..(84)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (89)..(101)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (109)..(121)

<223> Helix C

<400> 13

Leu	Lys	Ala	Lys	Lys	Glu	Asp	Gly	Asn	Lys	Ala	Phe	Lys	Glu	Gly	Asn
1				5					10					15	

Tyr	Lys	Leu	Ala	Tyr	Glu	Leu	Tyr	Thr	Glu	Ala	Leu	Gly	Ile	Asp	Pro
		20					25						30		

Asn	Asn	Ile	Lys	Thr	Asn	Ala	Lys	Leu	Tyr	Cys	Asn	Arg	Gly	Thr	Val
	35					40					45				

Asn	Ser	Lys	Leu	Arg	Lys	Leu	Asp	Asp	Ala	Ile	Glu	Asp	Cys	Thr	Asn
	50					55					60				

Ala	Val	Lys	Leu	Asp	Asp	Thr	Tyr	Ile	Lys	Ala	Tyr	Leu	Arg	Arg	Ala
65				70						75					80

Gln	Cys	Tyr	Met	Asp	Thr	Glu	Gln	Tyr	Glu	Glu	Ala	Val	Arg	Asp	Tyr
			85					90						95	

Glu	Lys	Val	Tyr	Gln	Thr	Glu	Lys	Thr	Lys	Glu	His	Lys	Gln	Leu	Leu
		100						105						110	

Lys	Asn	Ala	Gln	Leu	Glu	Leu	Lys	Lys	Ser	Lys	Arg	Lys	Asp
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

115

120

125

<210> 14
<211> 122
<212> PRT
<213> Homo sapiens

<220>
<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TTC3 in
Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 231
der TTC3-Sequenz in Fig.3.

<220>
<221> HELIX
<222> (1)..(12)
<223> Helix 1A

<220>
<221> HELIX
<222> (17)..(29)
<223> Helix 1B

<220>
<221> HELIX
<222> (35)..(46)
<223> Helix 2A

<220>
<221> HELIX
<222> (51)..(63)
<223> Helix 2B

<220>
<221> HELIX
<222> (69)..(80)
<223> Helix 3A

<220>
<221> HELIX
<222> (85)..(97)
<223> Helix 3B

<220>
<221> HELIX
<222> (105)..(117)
<223> Helix C

<400> 14

Gly Glu Leu Met Lys Met Lys Gly Asn Glu Glu Phe Ser Lys Glu Arg
 1 5 10 15

Phe Asp Ile Ala Ile Ile Tyr Tyr Thr Arg Ala Ile Glu Tyr Arg Pro
 20 25 30

Glu Asn Tyr Leu Leu Tyr Gly Asn Arg Ala Leu Cys Phe Leu Arg Thr
 35 40 45

Gly Gln Phe Arg Asn Ala Leu Gly Asp Gly Lys Arg Ala Thr Ile Leu
 50 55 60

Lys Asn Thr Trp Pro Lys Gly His Tyr Arg Tyr Cys Asp Ala Leu Ser
 65 70 75 80

Met Leu Gly Glu Tyr Asp Trp Ala Leu Gln Ala Asn Ile Lys Ala Gln
 85 90 95

Lys Leu Cys Lys Asn Asp Pro Glu Gly Ile Lys Asp Leu Ile Gln Gln
 100 105 110

His Val Lys Leu Gln Lys Gln Ile Glu Asp
 115 120

<210> 15

<211> 126

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TTC4 in
 Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
 genannte Aminosäure der vorliegenden Sequenz
 entspricht der Aminosäure 79 der TTC4-Sequenz in
 Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (39)..(50)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (55)..(67)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (73)..(84)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (89)..(101)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (109)..(121)

<223> Helix C

<400> 15

Ala	Lys	Thr	Tyr	Lys	Asp	Glu	Gly	Asn	Asp	Tyr	Phe	Lys	Glu	Lys	Asp
1				5					10					15	

Tyr	Lys	Lys	Ala	Val	Ile	Ser	Tyr	Thr	Glu	Gly	Leu	Lys	Lys	Lys	Cys
			20					25						30	

Ala	Asp	Pro	Asp	Leu	Asn	Ala	Val	Leu	Tyr	Thr	Asn	Arg	Ala	Ala	Ala
		35					40					45			

Gln	Tyr	Tyr	Leu	Gly	Asn	Phe	Arg	Ser	Ala	Leu	Asn	Asp	Val	Thr	Ala
	50					55						60			

Ala	Arg	Lys	Leu	Lys	Pro	Cys	His	Leu	Lys	Ala	Ile	Ile	Arg	Gly	Ala
65					70					75					80

Leu	Cys	His	Leu	Glu	Leu	Ile	His	Phe	Ala	Glu	Ala	Val	Asn	Trp	Cys
			85						90						95

Asp	Glu	Gly	Leu	Gln	Ile	Asp	Ala	Lys	Glu	Lys	Lys	Leu	Leu	Glu	Met
			100					105						110	

Arg Ala Lys Ala Asp Lys Leu Lys Arg Ile Glu Gln Arg Asp
115 120 125

<210> 16

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz IRSP in
Fig.3. Die im Protokoll an erster Stelle genannte
Aminosäure entspricht der Aminosäure 225 der
IRSP-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 16

Phe Lys Ala Leu Lys Glu Glu Gly Asn Gln Cys Val Asn Asp Lys Asn
1 5 10 15

Tyr Lys Asp Ala Leu Ser Lys Tyr Ser Glu Cys Leu Lys Ile Asn Asn
20 25 30

Lys Glu Cys Ala Ile Tyr Thr Asn Arg Ala Leu Cys Tyr Leu Lys Leu
35 40 45

Cys Gln Phe Glu Glu Ala Lys Gln Asp Cys Asp Gln Ala Leu Gln Leu
50 55 60

Ala Asp Gly Asn Val Lys Ala Phe Tyr Arg Arg Ala Leu Ala His Lys
65 70 75 80

Gly Leu Lys Asn Tyr Gln Lys Ser Leu Ile Asp Leu Asn Lys Val Ile
85 90 95

Leu Leu Asp Pro Ser Ile Ile Glu Ala Lys Met Glu Leu Glu Glu Val
100 105 110

Thr Arg Leu Leu Asn Leu Lys Asp Lys Thr
115 120

<210> 17

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz SGT in Fig.3.
Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte
Aminosäure entspricht der Aminosäure 89 der
SGT-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 17

Ala	Glu	Arg	Leu	Lys	Thr	Glu	Gly	Asn	Glu	Gln	Met	Lys	Val	Glu	Asn
1				5					10					15	

Phe	Glu	Ala	Ala	Val	His	Phe	Tyr	Gly	Lys	Ala	Ile	Glu	Leu	Asn	Pro
			20					25					30		

Ala	Asn	Ala	Val	Tyr	Phe	Cys	Asn	Arg	Ala	Ala	Ala	Tyr	Ser	Lys	Leu
	35						40					45			

Gly	Asn	Tyr	Ala	Gly	Ala	Val	Gln	Asp	Cys	Glu	Arg	Ala	Ile	Cys	Ile
	50					55						60			

Asp	Pro	Ala	Tyr	Ser	Lys	Ala	Tyr	Gly	Arg	Met	Gly	Leu	Ala	Leu	Ser
65					70					75				80	

Ser	Leu	Asn	Lys	His	Val	Glu	Ala	Val	Ala	Tyr	Tyr	Lys	Lys	Ala	Leu
				85					90					95	

Glu	Leu	Asp	Pro	Asp	Asn	Glu	Thr	Tyr	Lys	Ser	Asn	Leu	Lys	Ile	Ala
			100					105						110	

Glu Leu Lys Leu Arg Glu Ala Pro Ser Pro
115 120

<210> 18

<211> 127

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Die vorliegende Sequenz entspricht der Sequenz KIAA0719 in Fig.3. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 114 der KIAA0719-Sequenz in Fig.3.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (40)..(51)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (56)..(68)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (74)..(85)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (90)..(102)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (110)..(122)

<223> Helix C

<400> 18

Ala Gln Ala Ala Lys Asn Lys Gly Asn Lys Tyr Phe Lys Ala Gly Lys
1 5 10 15

Tyr Glu Gln Ala Ile Gln Cys Tyr Thr Glu Ala Ile Ser Leu Cys Pro
20 25 30

Thr Glu Lys Asn Val Asp Leu Ser Thr Phe Tyr Gln Asn Arg Ala Ala
35 40 45

Ala Phe Glu Gln Leu Gln Lys Trp Lys Glu Val Ala Gln Asp Cys Thr
50 55 60

Lys Ala Val Glu Leu Asn Pro Lys Tyr Val Lys Ala Leu Phe Arg Arg
65 70 75 80

Ala Lys Ala His Glu Lys Leu Asp Asn Lys Lys Glu Cys Leu Glu Asp
85 90 95

Val Thr Ala Val Cys Ile Leu Glu Gly Phe Gln Asn Gln Gln Ser Met
100 105 110

Leu Leu Ala Asp Lys Val Leu Lys Leu Leu Gly Lys Glu Lys Ala
115 120 125

<210> 19

<211> 34

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (1) in
Fig.3A. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 4
der Sequenz (1) in Fig. 3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<400> 19

Val Asn Glu Leu Lys Glu Lys Gly Asn Lys Ala Leu Ser Val Gly Asn
 1 5 10 15

Ile Asp Asp Ala Leu Gln Cys Tyr Ser Glu Ala Ile Lys Leu Asp Pro
 20 25 30

His Asn

<210> 20

<211> 34

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (2) in Fig.
 3A. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
 genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 225
 der Sequenz (2) in Fig.3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<400> 20

Ala Leu Lys Glu Lys Glu Leu Gly Asn Asp Ala Tyr Lys Lys Lys Asp
 1 5 10 15

Phe Asp Thr Ala Leu Lys His Tyr Asp Lys Ala Lys Glu Leu Asp Pro
 20 25 30

Thr Asn

<210> 21

<211> 34

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (3) in Fig.3A. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 360 der Sequenz (3) in Fig. 3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<400> 21

Ala	Leu	Glu	Glu	Lys	Asn	Lys	Gly	Asn	Glu	Cys	Phe	Gln	Lys	Gly	Asp
1				5				10						15	

Tyr	Pro	Gln	Ala	Met	Lys	His	Tyr	Thr	Glu	Ala	Ile	Lys	Arg	Asn	Pro
			20					25					30		

Lys Asp

<210> 22

<211> 34

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (4) in Fig.3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 2B

<400> 22

His Val Leu Tyr Ser Asn Arg Ser Ala Ala Tyr Ala Lys Lys Gly Asp
 1 5 10 15

Tyr Gln Lys Ala Tyr Glu Asp Gly Cys Lys Thr Val Asp Leu Lys Pro
 20 25 30

Asp Trp

<210> 23

<211> 41

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (5) in
 Fig.3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1) .. (12)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (17) .. (29)

<223> Helix 2B

<400> 23

Met Thr Tyr Ile Thr Asn Gln Ala Ala Val Tyr Phe Glu Lys Gly Asp
 1 5 10 15

Tyr Asn Lys Cys Arg Glu Leu Cys Glu Lys Ala Ile Glu Val Gly Arg
 20 25 30

Glu Asn Arg Glu Asp Tyr Arg Gln Ile
 35 40

<210> 24

<211> 34

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (6) in
 Fig.3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 2B

<400> 24

Ala	Lys	Leu	Tyr	Ser	Asn	Arg	Ala	Ala	Cys	Tyr	Thr	Lys	Leu	Leu	Glu
1				5					10					15	

Phe	Gln	Leu	Ala	Leu	Lys	Asp	Cys	Glu	Glu	Cys	Ile	Gln	Leu	Glu	Pro
			20					25					30		

Thr Phe

<210> 25

<211> 32

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (7) in Fig.3A. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 72 in Sequenz (7) in Fig.3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 3B

<400> 25

Gly	Lys	Gly	Tyr	Ser	Arg	Lys	Ala	Ala	Ala	Leu	Glu	Phe	Leu	Asn	Arg
1				5					10					15	

Phe	Glu	Glu	Ala	Lys	Arg	Thr	Tyr	Glu	Glu	Gly	Leu	Lys	His	Glu	Ala
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----

20

25

30

<210> 26

<211> 32

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (8) in Fig.3A. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 300 in Sequenz (8) in Fig.3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 3B

<400> 26

Ala	Lys	Ala	Tyr	Ala	Arg	Ile	Gly	Asn	Ser	Tyr	Phe	Lys	Glu	Glu	Lys
1				5					10					15	

Tyr	Lys	Asp	Ala	Ile	His	Phe	Tyr	Asn	Lys	Ser	Leu	Ala	Glu	His	Arg
			20					25					30		

<210> 27

<211> 32

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz (9) in Fig.3A. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 428 in Sequenz (9) in Fig.3A.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 3B

<400> 27

Ile	Lys	Gly	Tyr	Thr	Arg	Lys	Ala	Ala	Ala	Leu	Glu	Ala	Met	Lys	Asp
1				5					10					15	

Tyr	Thr	Lys	Ala	Met	Asp	Val	Tyr	Gln	Lys	Ala	Leu	Asp	Leu	Asp	Ser
			20					25					30		

<210> 28

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TPR1 in Fig.3B. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 4 der TPR1-Sequenz in Fig.3B.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 28

Val	Asn	Glu	Leu	Lys	Glu	Lys	Gly	Asn	Lys	Ala	Leu	Ser	Val	Gly	Asn
1				5					10					15	

Ile	Asp	Asp	Ala	Leu	Gln	Cys	Tyr	Ser	Glu	Ala	Ile	Lys	Leu	Asp	Pro
			20					25					30		

His	Asn	His	Val	Leu	Tyr	Ser	Asn	Arg	Ser	Ala	Ala	Tyr	Ala	Lys	Lys
		35					40					45			

Gly	Asp	Tyr	Gln	Lys	Ala	Tyr	Glu	Asp	Gly	Cys	Lys	Thr	Val	Asp	Leu
	50					55					60				

Lys	Pro	Asp	Trp	Gly	Lys	Gly	Tyr	Ser	Arg	Lys	Ala	Ala	Ala	Leu	Glu
65					70					75				80	

Phe	Leu	Asn	Arg	Phe	Glu	Glu	Ala	Lys	Arg	Thr	Tyr	Glu	Glu	Gly	Leu
				85					90					95	

Lys	His	Glu	Ala	Asn	Asn	Pro	Gln	Leu	Lys	Glu	Gly	Leu	Gln	Asn	Met
			100					105					110		

Glu	Ala	Arg	Leu	Ala	Glu	Arg	Lys	Phe	Met
			115				120		

<210> 29

<211> 128

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Die vorliegende Sequenz entspricht der Sequenz
TPR2A in Fig.3B. Die im Sequenzprotokoll an erster
Stelle genannte Aminosäure entspricht der
Aminosäure 225 der TPR2A-Sequenz in Fig.3B.

<220>

<221> HELIX

<222> (1)..(12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17)..(29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (76)..(87)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (92)..(104)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (111)..(123)

<223> Helix C

<400> 29

Ala Leu Lys Glu Lys Glu Leu Gly Asn Asp Ala Tyr Lys Lys Lys Asp

1

5

10

15

```

Phe Asp Thr Ala Leu Lys His Tyr Asp Lys Ala Lys Glu Leu Asp Pro
      20                      25                      30

Thr Asn Met Thr Tyr Ile Thr Asn Gln Ala Ala Val Tyr Phe Glu Lys
      35                      40                      45

Gly Asp Tyr Asn Lys Cys Arg Glu Leu Cys Glu Lys Ala Ile Glu Val
      50                      55                      60

Gly Arg Glu Asn Arg Glu Asp Tyr Arg Gln Ile Ala Lys Ala Tyr Ala
      65                      70                      75                      80

Arg Ile Gly Asn Ser Tyr Phe Lys Glu Glu Lys Tyr Lys Asp Ala Ile
      85                      90                      95

His Phe Tyr Asn Lys Ser Leu Ala Glu His Arg Thr Pro Asp Val Leu
      100                     105                     110

Lys Lys Cys Gln Gln Ala Glu Lys Ile Leu Lys Glu Gln Glu Arg Leu
      115                     120                     125

```

<210> 30

<211> 122

<212> PRT

<213> Homo sapiens

<220>

<223> Diese Sequenz entspricht der Sequenz TPR2B in
 Fig.3B. Die im Sequenzprotokoll an erster Stelle
 genannte Aminosäure entspricht der Aminosäure 360
 der Sequenz TPR2B in Fig.3B.

<220>

<221> HELIX

<222> (1) .. (12)

<223> Helix 1A

<220>

<221> HELIX

<222> (17) .. (29)

<223> Helix 1B

<220>

<221> HELIX

<222> (35)..(46)

<223> Helix 2A

<220>

<221> HELIX

<222> (51)..(63)

<223> Helix 2B

<220>

<221> HELIX

<222> (69)..(80)

<223> Helix 3A

<220>

<221> HELIX

<222> (85)..(97)

<223> Helix 3B

<220>

<221> HELIX

<222> (105)..(117)

<223> Helix C

<400> 30

Ala	Leu	Glu	Glu	Lys	Asn	Lys	Gly	Asn	Glu	Cys	Phe	Gln	Lys	Gly	Asp
1				5					10					15	

Tyr	Pro	Gln	Ala	Met	Lys	His	Tyr	Thr	Glu	Ala	Ile	Lys	Arg	Asn	Pro
			20					25					30		

Lys	Asp	Ala	Lys	Leu	Tyr	Ser	Asn	Arg	Ala	Ala	Cys	Tyr	Thr	Lys	Leu
	35						40					45			

Leu	Glu	Phe	Gln	Leu	Ala	Leu	Lys	Asp	Cys	Glu	Glu	Cys	Ile	Gln	Leu
	50					55					60				

Glu	Pro	Thr	Phe	Ile	Lys	Gly	Tyr	Thr	Arg	Lys	Ala	Ala	Ala	Leu	Glu
65					70					75				80	

Ala	Met	Lys	Asp	Tyr	Thr	Lys	Ala	Met	Asp	Val	Tyr	Gln	Lys	Ala	Leu
				85					90					95	

Asp	Leu	Asp	Ser	Ser	Cys	Lys	Glu	Ala	Ala	Asp	Gly	Tyr	Gln	Arg	Cys
			100					105					110		

Met	Met	Ala	Gln	Tyr	Asn	Arg	His	Asp	Ser
			115				120		

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

ational Application No
PCT/EP 01/03617

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC 7 C12N15/12 C07K14/47 A61K38/17 G01N33/50 G06F17/50

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC 7 C07K G06F G01N

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

BIOSIS, EPO-Internal, STRAND

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	YOUNG JASON C ET AL: "Specific binding of tetratricopeptide repeat proteins to the C-terminal 12-kDa domain of hsp90." JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, vol. 273, no. 29, 17 July 1998 (1998-07-17), pages 18007-18010, XP002174788 ISSN: 0021-9258 cited in the application	1-18, 28-32,49
Y	page 18010, paragraph 2; figure 1A --- -/--	34-37

☒ Further documents are listed in the continuation of box C.

☒ Patent family members are listed in annex.

* Special categories of cited documents:

- *A* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
- *E* earlier document but published on or after the International filing date
- *L* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
- *O* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
- *P* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

- *T* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
- *X* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
- *Y* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.
- *Z* document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

13 August 2001

Date of mailing of the international search report

29/08/2001

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5618 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Kania, T

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No

PCT/EP 01/03617

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CHEN SHIYING ET AL: "Interactions of p60, a mediator of progesterone receptor assembly, with heat shock proteins Hsp90 and Hsp70." MOLECULAR ENDOCRINOLOGY, vol. 10, no. 6, 1996, pages 682-693, XP001013471 ISSN: 0888-8809 cited in the application the whole document	1-18, 28-32,49
X	DAS AMIT K ET AL: "The structure of the tetratricopeptide repeats of protein phosphatase 5: Implications for TPR-mediated protein-protein interactions." EMBO (EUROPEAN MOLECULAR BIOLOGY ORGANIZATION) JOURNAL, vol. 17, no. 5, 2 March 1998 (1998-03-02), pages 1192-1199, XP002174789 ISSN: 0261-4189 cited in the application the whole document	1,3,19, 23,24,27
X	OWENS-GRILLO JANET K ET AL: "A model of protein targeting mediated by immunophilins and other proteins that bind to hsp90 via tetratricopeptide repeat domains." JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, vol. 271, no. 23, 1996, pages 13468-13475, XP002174790 ISSN: 0021-9258 cited in the application page 13469, right-hand column, paragraph 2	38
X	WO 97 12975 A (US HEALTH ;UNIV JOHNS HOPKINS (US)) 10 April 1997 (1997-04-10) SEQ ID NO:16	33,35
X	EP 0 927 757 A (LEADD B V) 7 July 1999 (1999-07-07) SEQ ID NO:15	56-58
X	WO 99 27080 A (INCYTE PHARMA INC ;CORLEY NEIL C (US); BANDMAN OLGA (US); LAL PREE) 3 June 1999 (1999-06-03) SEQ ID NO:4; Abbildung 4	56-58,60
X	DATABASE SWALL 'Online! AC P53804, 1 October 1996 (1996-10-01) OHIRA M. ET AL.: "TTC3" XP002174797 abstract	56-58

-/--

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International Application No

PCT/EP 01/03617

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	SU GUANFANG ET AL: "TTC4, a novel human gene containing the tetratricopeptide repeat and mapping to the region of chromosome 1p31 that is frequently deleted in sporadic breast cancer." GENOMICS, vol. 55, no. 2, 15 January 1999 (1999-01-15), pages 157-163, XP002174791 ISSN: 0888-7543 figures 4,5	56-58
X	WO 00 12702 A (BURGESS CHRISTOPHER C ;CARROLL EDDIE III (US); CATINO THEODORE J () 9 March 2000 (2000-03-09) SEQ ID NO:218	56-58
X	KORDES ELISABETH ET AL: "Isolation and characterization of human SGT and identification of homologues in Saccharomyces cerevisiae and Caenorhabditis elegans." GENOMICS, vol. 52, no. 1, 15 August 1998 (1998-08-15), pages 90-94, XP002174792 ISSN: 0888-7543 figure 2	56-58
X	NAGASE T ET AL: "PREDICTION OF THE CODING SEQUENCES OF UNIDENTIFIED HUMAN GENES. XI. THE COMPLETE SEQUENCES OF 100 NEW CDNA CLONES FROM BRAIN WHICH CODE FOR LARGE PROTEINS IN VITRO" DNA RESEARCH, UNIVERSAL ACADEMY PRESS, JP, vol. 5, 1998, pages 277-286, XP000853885 ISSN: 1340-2838 Tabelle 1; AB018262	56-58
Y	CHEN SHIYING ET AL: "Differential interactions of p23 and the TPR-containing proteins Hop, Cyp40, FKBP52 and FKBP51 with Hsp90 mutants." CELL STRESS & CHAPERONES, vol. 3, no. 2, June 1998 (1998-06), pages 118-129, XP002174793 ISSN: 1355-8145 page 128, right-hand column, line 16 - line 21	34-37

-/--

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

national Application No

PCT/EP 01/03617

C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	LIU FU-HWA ET AL: "Specific interaction of the 70-kDa heat shock cognate protein with the tetratricopeptide repeats." JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, vol. 274, no. 48, 26 November 1999 (1999-11-26), pages 34425-34432, XP002174794 ISSN: 0021-9258 page 34432, left-hand column, paragraph 1; figure 10A -----	
A	WO 00 14105 A (AGOURON PHARMA) 16 March 2000 (2000-03-16) the whole document -----	19-27, 41-55
A	CARRELLO AMERIGO ET AL: "The common tetratricopeptide repeat acceptor site for steroid receptor-associated immunophilins and Hop is located in the dimerization domain of hsp90." JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, vol. 274, no. 5, 29 January 1999 (1999-01-29), pages 2682-2689, XP002174795 ISSN: 0021-9258 cited in the application the whole document -----	34-37
P,X	SCHEUFLER CLEMENS ET AL: "Structure of TPR domain-peptide complexes: Critical elements in the assembly of the Hsp70-Hsp90 multichaperone machine." CELL, vol. 101, no. 2, 14 April 2000 (2000-04-14), pages 199-210, XP002174796 ISSN: 0092-8674 the whole document -----	1-60

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/EP01/03617

ADDITIONAL MATTER PCT/ISA/210

Continuation of box I.1

Claims: 1-18, 50-52

The above claims do not meet the requirements of PCT Rule 39.1(v), because the above concerns a reproduction of information. The search of said claims was, therefore, carried out exclusively on the basis of the underlying protein sequences and the crystal structures thereof.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP 01/03617

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
WO 9712975	A	10-04-1997	US 5994062 A	30-11-1999
			US 6251586 B	26-06-2001
			AU 7386496 A	28-04-1997
			EP 0861323 A	02-09-1998
			JP 2000500322 T	18-01-2000
			AU 4663597 A	24-04-1998
			WO 9814469 A	09-04-1998
EP 0927757	A	07-07-1999	AU 1511899 A	16-06-1999
			EP 1036173 A	20-09-2000
			WO 9928461 A	10-06-1999
WO 9927080	A	03-06-1999	US 6194186 B	27-02-2001
			AU 1456899 A	15-06-1999
			EP 1040187 A	04-10-2000
			US 6096308 A	01-08-2000
WO 0012702	A	09-03-2000	AU 5691699 A	21-03-2000
			EP 1108021 A	20-06-2001
			US 6262334 B	17-07-2001
WO 0014105	A	16-03-2000	AU 5809399 A	27-03-2000
			EP 1109823 A	27-06-2001

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

tionales Aktenzeichen
PCT/EP 01/03617

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES		
IPK 7	C12N15/12	C07K14/47 A61K38/17 G01N33/50 G06F17/50
Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK		
B. RECHERCHIERTE GEBIETE		
Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)		
IPK 7 C07K G06F G01N		
Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen		
Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)		
BIOSIS, EPO-Internal, STRAND		
C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	YOUNG JASON C ET AL: "Specific binding of tetratricopeptide repeat proteins to the C-terminal 12-kDa domain of hsp90." JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, Bd. 273, Nr. 29, 17. Juli 1998 (1998-07-17), Seiten 18007-18010, XP002174788 ISSN: 0021-9258 in der Anmeldung erwähnt	1-18, 28-32, 49
Y	Seite 18010, Absatz 2; Abbildung 1A --- -/-	34-37
<input checked="" type="checkbox"/> Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen <input checked="" type="checkbox"/> Siehe Anhang Patentfamilie		
* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen : *A* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist *E* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist *L* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt) *O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht *P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist *T* Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist *X* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden *Y* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist *Z* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist		
Datum des Abschlusses der internationalen Recherche		Absenddatum des internationalen Recherchenberichts
13. August 2001		29/08/2001
Name und Postanschrift der internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016		Bevollmächtigter Bediensteter Kania, T

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	<p>CHEN SHIYING ET AL: "Interactions of p60, a mediator of progesterone receptor assembly, with heat shock proteins Hsp90 and Hsp70."</p> <p>MOLECULAR ENDOCRINOLOGY, Bd. 10, Nr. 6, 1996, Seiten 682-693, XP001013471</p> <p>ISSN: 0888-8809</p> <p>in der Anmeldung erwähnt</p> <p>das ganze Dokument</p>	1-18, 28-32,49
X	<p>DAS AMIT K ET AL: "The structure of the tetratricopeptide repeats of protein phosphatase 5: Implications for TPR-mediated protein-protein interactions."</p> <p>EMBO (EUROPEAN MOLECULAR BIOLOGY ORGANIZATION) JOURNAL, Bd. 17, Nr. 5, 2. März 1998 (1998-03-02), Seiten 1192-1199, XP002174789</p> <p>ISSN: 0261-4189</p> <p>in der Anmeldung erwähnt</p> <p>das ganze Dokument</p>	1,3,19, 23,24,27
X	<p>OWENS-GRILLO JANET K ET AL: "A model of protein targeting mediated by immunophilins and other proteins that bind to hsp90 via tetratricopeptide repeat domains."</p> <p>JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, Bd. 271, Nr. 23, 1996, Seiten 13468-13475, XP002174790</p> <p>ISSN: 0021-9258</p> <p>in der Anmeldung erwähnt</p> <p>Seite 13469, rechte Spalte, Absatz 2</p>	38
X	<p>WO 97 12975 A (US HEALTH ;UNIV JOHNS HOPKINS (US)) 10. April 1997 (1997-04-10)</p> <p>SEQ ID NO:16</p>	33,35
X	<p>EP 0 927 757 A (LEADD B V)</p> <p>7. Juli 1999 (1999-07-07)</p> <p>SEQ ID NO:15</p>	56-58
X	<p>WO 99 27080 A (INCYTE PHARMA INC ;CORLEY NEIL C (US); BANDMAN OLGA (US); LAL PREE)</p> <p>3. Juni 1999 (1999-06-03)</p> <p>SEQ ID NO:4; Abbildung 4</p>	56-58,60
X	<p>DATABASE SWALL 'Online!'</p> <p>AC P53804, 1. Oktober 1996 (1996-10-01)</p> <p>OHIRA M. ET AL.: "TTC3"</p> <p>XP002174797</p> <p>Zusammenfassung</p>	56-58

-/--

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

ationales Aktenzeichen

PCT/EP 01/03617

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
X	SU GUANFANG ET AL: "TTC4, a novel human gene containing the tetratricopeptide repeat and mapping to the region of chromosome 1p31 that is frequently deleted in sporadic breast cancer." GENOMICS, Bd. 55, Nr. 2, 15. Januar 1999 (1999-01-15), Seiten 157-163, XP002174791 ISSN: 0888-7543 Abbildungen 4,5 ----	56-58
X	WO 00 12702 A (BURGESS CHRISTOPHER C ;CARROLL EDDIE III (US); CATINO THEODORE J () 9. März 2000 (2000-03-09) SEQ ID NO:218 ----	56-58
X	KORDES ELISABETH ET AL: "Isolation and characterization of human SGT and identification of homologues in Saccharomyces cerevisiae and Caenorhabditis elegans." GENOMICS, Bd. 52, Nr. 1, 15. August 1998 (1998-08-15), Seiten 90-94, XP002174792 ISSN: 0888-7543 Abbildung 2 ----	56-58
X	NAGASE T ET AL: "PREDICTION OF THE CODING SEQUENCES OF UNIDENTIFIED HUMAN GENES. XI. THE COMPLETE SEQUENCES OF 100 NEW CDNA CLONES FROM BRAIN WHICH CODE FOR LARGE PROTEINS IN VITRO" DNA RESEARCH, UNIVERSAL ACADEMY PRESS, JP, Bd. 5, 1998, Seiten 277-286, XP000853885 ISSN: 1340-2838 Tabelle 1; AB018262 ----	56-58
Y	CHEN SHIYING ET AL: "Differential interactions of p23 and the TPR-containing proteins Hop, Cyp40, FKBP52 and FKBP51 with Hsp90 mutants." CELL STRESS & CHAPERONES, Bd. 3, Nr. 2, Juni 1998 (1998-06), Seiten 118-129, XP002174793 ISSN: 1355-8145 Seite 128, rechte Spalte, Zeile 16 - Zeile 21 ----- -/--	34-37

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	LIU FU-HWA ET AL: "Specific interaction of the 70-kDa heat shock cognate protein with the tetratricopeptide repeats." JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, Bd. 274, Nr. 48, 26. November 1999 (1999-11-26), Seiten 34425-34432, XP002174794 ISSN: 0021-9258 Seite 34432, linke Spalte, Absatz 1; Abbildung 10A	
A	WO 00 14105 A (AGOURON PHARMA) 16. März 2000 (2000-03-16) das ganze Dokument	19-27, 41-55
A	CARRELLO AMERIGO ET AL: "The common tetratricopeptide repeat acceptor site for steroid receptor-associated immunophilins and Hop is located in the dimerization domain of hsp90." JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY, Bd. 274, Nr. 5, 29. Januar 1999 (1999-01-29), Seiten 2682-2689, XP002174795 ISSN: 0021-9258 in der Anmeldung erwähnt das ganze Dokument	34-37
P,X	SCHEUFLEER CLEMENS ET AL: "Structure of TPR domain-peptide complexes: Critical elements in the assembly of the Hsp70-Hsp90 multichaperone machine." CELL, Bd. 101, Nr. 2, 14. April 2000 (2000-04-14), Seiten 199-210, XP002174796 ISSN: 0092-8674 das ganze Dokument	1-60

WEITERE ANGABEN

PCT/ISA/ 210

Fortsetzung von Feld I.1

Ansprüche Nr.: 1-18, 50-52

Die oben genannten Ansprüche entsprechen nicht den Erfordernissen der Regel 39.1(v) PCT, da es sich bei diesen um Ansprüche bezüglich einer Wiedergabe von Informationen handelt. Die Ansprüche wurden demgemäss ausschliesslich anhand der zugrundeliegenden Proteinsequenz bzw. deren Kristallstruktur recherchiert.

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 01/03617

Im Recherchenbericht angeführtes Patentdokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
WO 9712975 A	10-04-1997	US 5994062 A	30-11-1999
		US 6251586 B	26-06-2001
		AU 7386496 A	28-04-1997
		EP 0861323 A	02-09-1998
		JP 2000500322 T	18-01-2000
		AU 4663597 A	24-04-1998
		WO 9814469 A	09-04-1998
EP 0927757 A	07-07-1999	AU 1511899 A	16-06-1999
		EP 1036173 A	20-09-2000
		WO 9928461 A	10-06-1999
WO 9927080 A	03-06-1999	US 6194186 B	27-02-2001
		AU 1456899 A	15-06-1999
		EP 1040187 A	04-10-2000
		US 6096308 A	01-08-2000
WO 0012702 A	09-03-2000	AU 5691699 A	21-03-2000
		EP 1108021 A	20-06-2001
		US 6262334 B	17-07-2001
WO 0014105 A	16-03-2000	AU 5809399 A	27-03-2000
		EP 1109823 A	27-06-2001